

Numerische Methoden zur Lösung von Multiskalenproblemen

Dissertation

zur
Erlangung des Grades
eines
Doktors der Naturwissenschaften

Der Fakultät für Mathematik
der Technischen Universität Dortmund
vorgelegt von

Dipl.-Math. Alexander Freese

August 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Notation	4
1.2	Das Modellproblem	6
1.3	Die Notwendigkeit einer speziellen Lösungsmethode	7
2	Gittergenerierung	11
2.1	Repräsentation des Gebietes	12
2.2	Arbeitsweise des Gitteralgorithmus	13
2.3	Nichtkonstante Dichtefunktionen	17
2.4	Qualität der Gitter	17
2.5	R-Adaptivität	18
2.6	Anwendung: Generierung eines komplizierten Gitters aus realistischen Daten	20
3	Multiskalen Finite Elemente Methode	25
3.1	Erste heuristische Ansätze und Repräsentative-Volumenelement-Methode	25
3.1.1	Erste einfache Ansätze	25
3.1.2	Das repräsentative Volumenelement	26
3.2	Die Multiskalen Finite Elemente Methode	27
3.2.1	Konstruktion	27
3.2.2	Konvergenz der Methode	29
3.2.3	Numerische Ergebnisse am einfachen Modellproblem	30
3.2.4	Bedingung an das feine Gitter	31
3.2.5	Numerische Umsetzung der MsFEM	32
4	Homogenisierung	36
4.1	Theorie der Homogenisierung	36
4.1.1	Grenzwerte stark oszillierender Funktionen	37
4.1.2	Periodische Funktionen	39
4.1.3	Das Modellproblem	39
4.1.4	Zwei wichtige Spezialfälle	41
4.1.5	Das Zellenproblem	43
4.1.6	Konvergenz der Homogenisierung elliptischer Gleichungen	44
4.1.7	Korrekturterm erster Ordnung	47
4.1.8	Der Einfluss von Randschichten	48

4.2	Konvergenz der Multiskalen Finite Elemente Methode	50
4.3	Numerische Homogenisierung	53
4.3.1	Lösen des Zellenproblems	54
4.3.2	Berechnung der homogenisierten Koeffizientenmatrix . .	58
4.3.3	Lösung der homogenisierten Gleichung für das Modell- problem	61
4.3.4	Adaptive Homogenisierung	62
5	Ein realistisches Beispiel	69
5.1	Motivation	69
5.2	Lösung mit der Multiskalen Finite Elemente Methode	72
5.3	Lösung durch numerische Homogenisierung	73
6	Zusammenfassung	76

Kapitel 1

Einleitung

Bei der Beschreibung vieler makroskopischer Phänomene sind oftmals Einflüsse zu berücksichtigen, die auf einer um viele Ordnungen kleineren Größenskala stattfinden. Bei einem der ältesten Baustoffe der Welt, Holz, lassen sich zum Beispiel bestimmte Eigenschaften nur über die mikroskopische Struktur der Holzfasern beschreiben. Der Verlauf eines ganzen Flusses ist nicht zuletzt von der Strömung durch den Sand des Flussbettes abhängig. Weiterhin sind für die Aerodynamik von Flugzeugen mikroskopische Luftwirbel entscheidend und ähnliche mikroskopische Wirbel werden durch moderne Schwimmanzüge zur Reduzierung der Reibung erzeugt. Ganz besonders haben in der jüngeren Vergangenheit Verbundwerkstoffe wie Kohlefaser, Aramid oder gar Bambus an Bedeutung gewonnen.

Das Modellieren der Verformungseigenschaften von Bauteilen aus solchen Werkstoffen durch numerische Methoden ist unlängst zu einem häufigen Problem in der Luft- und Raumfahrt oder sogar in der Entwicklung von Sportgeräten geworden. Die Lösung der Modellierung der meisten obigen Phänomene zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen ist in aller Regel nur numerisch möglich. Hängen makroskopische Phänomene auf eine wie hier beschriebene Art stark von mikroskopischen Eigenschaften ab, spricht man von einem *Multiskalenproblem*. Die Umsetzung mit Finiten Elementen stellt dabei eine große Herausforderung dar, denn will man die Mikroskala korrekt wiedergeben, so resultiert dies schnell in einem Gitter mit mehr Unbekannten, als selbst modernste Rechner zu speichern in der Lage sind.

Im Rahmen dieser Arbeit wollen wir uns mit Methoden zur Lösung von Multiskalenproblemen mit Finiten Elementen befassen. Ziel ist es, eine Methode auf Basis der mathematischen Homogenisierungstheorie zu formulieren und diese mit anderen Methoden zu vergleichen. Wir leiten zunächst die populärste Methode für die Lösung von Multiskalenproblemen her, die Multiskalen Finite Elemente Methode, und beleuchten hierbei einige interessante, in der Literatur kaum beschriebene Details der praktischen Umsetzung anhand der Analyse eines Modellproblems. Wir geben anschließend die wichtigsten Konstruktionen und Aussagen der Homogenisierungstheorie wieder, um eine Methode zu motivieren, die die Ideen der Homogenisierungstheorie direkt umsetzt. Neben ei-

nigen bei der Lösung auftauchenden Problemen diskutieren wir ein adaptives Verfahren, das die Informationen der Mikroskala bei der Berechnung der lokalen Fehlergrößen berücksichtigt. Hierfür bedienen wir uns der *R-Adaptivität*, welche ein besonderes Vorgehen bei der Gitterkonstruktion erfordert. Deshalb ist es uns im Vorfeld auch wichtig, einen Gitteralgorithmus zu beschreiben, den wir auf der Basis eines in der Literatur bekannten Algorithmus weiter entwickelt haben, so dass die R-Adaptivität leicht und flexibel umsetzbar ist. Darüber hinaus liefert der Algorithmus die Möglichkeit, sehr komplexe Geometrien zu triangulieren. Wir analysieren im Folgenden auch die Qualität der resultierenden Gitter.

In der Literatur finden sich nur sehr wenige numerische Tests an realistischen Problemen. Wir wollen daher schließlich die vorgestellten Techniken an einem Modellproblem diskutieren, welches die Anforderungen eines realistischen Problems erfüllt und die hierbei dominierenden Fehlereinflüsse beleuchten.

1.1 Notation

In diesem Abschnitt wollen wir die in der vorliegenden Arbeit verwendete Notation einführen und die wichtigsten Definitionen wiedergeben. Siehe im Einzelnen dazu auch [Kab99], [LL00] und [CD99].

Funktionenräume

Sei $x \in \mathbb{R}^n$ mit Koordinaten $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ und $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene Menge. Für $1 \leq p < \infty$ sei

$$\mathcal{L}^p(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid f \text{ messbar, } \int_{\Omega} |f(x)|^p dx < +\infty\}.$$

Das Integral ist hierbei im Sinne eines Lebesgueintegrals zu verstehen. Für $p = \infty$ setzen wir

$$\mathcal{L}^\infty(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \text{esssup}(|f|) < +\infty\}.$$

Mit den Normen

$$\begin{aligned} \|f\|_{L^p} &= \left(\int_{\Omega} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leq p < \infty, \\ \|f\|_{L^\infty} &= \text{esssup}(|f|) \end{aligned}$$

definieren wir die Lebesgueräume $L^p(\Omega)$ als die Menge der Äquivalenzklassen bezüglich der Äquivalenzrelation $f \equiv g \Leftrightarrow f = g$ fast überall.

Für eine kompakte Menge $K \subseteq \mathbb{R}^n$ sei

$$\mathcal{D}(K) = C_0^\infty(K) = \{\varphi \in C^\infty \mid \text{supp}(\varphi) \subseteq K\}$$

der Raum der glatten Funktionen mit kompakten Träger. Der Raum der *Distributionen* \mathcal{D}' ist definiert als der Dualraum von \mathcal{D} : auf einer offenen Menge

$\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ist eine Distribution $u \in \mathcal{D}'$ eine Linearform $u : \mathcal{D}(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$, deren Einschränkungen $u|_{\mathcal{D}(K)} \mapsto \mathbb{C}$ für alle kompakten Mengen $K \subseteq \Omega$ stetig sind.

Wir wollen den Raum $H^1(\Omega)$ als Raum aller Funktionen $f \in L^2(\Omega)$ definieren, für die eine *schwache* Ableitung $\nabla f \in L^2(\Omega)$ existiert. Eine schwache Ableitung oder *Distributionsableitung* $\nabla f \in L^2(\Omega)$ bedeutet hierbei, dass ϕ_1, \dots, ϕ_n in $L^2(\Omega)$ existieren, so dass gilt

$$\int_{\Omega} f(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(x) dx = - \int_{\Omega} \phi_i(x) \varphi(x) dx, \quad i = 1, \dots, n, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Die zugehörige Norm ist

$$\|f\|_{H^1(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |f(x)|^2 dx + \int_{\Omega} |\nabla f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Analog definieren wir für $k \geq 1$ die *Sobolevräume* $H^k(\Omega)$: sei $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}_0^n$ ein Multiindex mit $|\alpha| = \sum_{j=1}^n \alpha_j$, und wir schreiben

$$D^{\alpha} f := \partial_1^{\alpha_1} \dots \partial_n^{\alpha_n} f,$$

wobei die Ableitungen im Sinne der Distributionen zu verstehen sind. Nun definieren wir

$$H^k(\Omega) = \{f \in L^2(\Omega) \mid D^{\alpha} f \in L^2(\Omega) \text{ für } |\alpha| \leq k\}$$

und die Norm

$$\|f\|_{H^k(\Omega)} = \left(\sum_{|\alpha| \leq k} \int_{\Omega} |D^{\alpha} f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Die Sobolevräume H^k sind Hilberträume. Wir bezeichnen mit

$$(f, g) = \int_{\Omega} f g dx, \quad f, g \in L^2(\Omega)$$

das L^2 -Skalarprodukt und die *duale Paarung* durch $\langle f, g \rangle_{H^k(\Omega), H^{-k}(\Omega)}$. Wir definieren so $H^{-1}(\Omega)$ als den Dualraum von $H_0^1(\Omega)$, da durch $\langle f, \cdot \rangle_{H^{-1}(\Omega), H_0^1(\Omega)} : H_0^1 \rightarrow \mathbb{R}$ eine lineare Abbildung erklärt wird.

Analog setzen wir für $1 \leq p < \infty$

$$W^{k,p}(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid D^{\alpha} f(x) \in L^p(\Omega) \text{ für } |\alpha| \leq k\}.$$

Multiskalenprobleme

Im Rahmen der Multiskalenprobleme ist es sinnvoll, die von einer kleinen Skala abhängenden Objekte entsprechend zu kennzeichnen. Diese Formulierung ist absichtlich sehr vage, da wir uns dabei so wenig wie möglich einschränken wollen. Wir schreiben u^{ε} für eine Funktion, die stark vom Ort abhängt, $\varepsilon \ll 1$.

Im einfachsten Fall ist u periodisch und ε gerade die Periode. Ist u^ε nicht periodisch, so ist ε als Größe eines charakteristischen Intervalls, auf dem die Werte variieren, zu interpretieren.

Es ist uns hierbei wichtig, zu erwähnen, dass sich Multiskalenprobleme nicht auf Probleme mit zwei Skalen beschränken: so kann die ε -Notation durch einen Multiindex $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$ für allgemeine Mehrskalenprobleme erweitert werden. Innerhalb dieser Arbeit beschränken wir uns jedoch auf zweiskalige Probleme.

Die Funktion u^ε kann hierbei auch sowohl als eine von einem festen Parameter ε abhängige Funktion als auch als eine Familie von solchen Abbildungen verstanden werden. In den meisten Zusammenhängen wollen wir u^ε im ersten Sinne verstehen; für das Konzept der Homogenisierungstheorie ist es jedoch fundamental, dass es sich bei ε auch um einen Index handelt, bezüglich dessen wir eine Familie kennzeichnen wollen.

Definition 1.1 Seien $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $\alpha, \beta > 0$ und $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Gebiet. Wir bezeichnen mit $M(\alpha, \beta, \Omega)$ die Menge aller $n \times n$ -Matrizen $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n} \in (L^\infty(\Omega))^{n \times n}$, so dass

$$\begin{aligned} i) \quad & (A(x)\lambda, \lambda) \geq \alpha|\lambda|^2 \\ ii) \quad & |A(x)\lambda| \leq \beta|\lambda| \end{aligned} \tag{1.1}$$

für alle $\lambda \in \mathbb{R}^n$ fast überall in Ω .

Falls nicht anders bezeichnet, so sei fortan für $\varepsilon > 0$ jede Matrix A^ε in $M(\alpha, \beta, \Omega)$ mit $0 < \alpha < \beta$ unabhängig von ε .

1.2 Das Modellproblem

Da es beim Modellieren von physikalischen Prozessen durch Differentialgleichungen zwangsläufig notwendig ist, idealisierende Annahmen zu treffen, können numerische Resultate nur für Modellprobleme erzielt werden. Es ist uns jedoch auch wichtig, dass die hier durchgeführten Untersuchungen Schlüsse für eine große Klasse von Problemen zulassen. Wir verwenden daher ein Standardproblem der Homogenisierungstheorie:

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) = f & \text{auf } \Omega \\ u^\varepsilon = 0 & \text{auf } \partial\Omega. \end{cases} \tag{1.2}$$

mit $f \in L^2(\Omega)$ und $A^\varepsilon \in M(\alpha, \beta, \Omega)$ ε -periodisch, $\varepsilon \ll 1$. Für feste $\varepsilon > 0$ ist diese Gleichung eindeutig lösbar (vgl. [Eva10]).

Die aus diesem Modellproblem gewonnenen Erkenntnisse können leicht auf Probleme der linearen Elastizität und der Wärmeleitung in hochgradig heterogenen Medien übertragen werden.

Später werden wir zeigen, dass für eine adäquate Approximation der Lösung von (1.2) mit klassischen Finiten Elementen eine Gitterwahl notwendig ist, für die die Gitterweite noch um einiges kleiner sein muss als ε . Für ein typisches Beispiel mit $\text{diam}(\Omega) \approx 1$ und $\varepsilon \approx 10^{-5}$ ergibt sich so schnell ein Netz mit 10^{20} Gitterpunkten. Die Speicherkapazitäten selbst moderner Rechner sind somit schnell überschritten.

Gesucht werden also Methoden, mit denen sich die Lösung von (1.2) durch Finite Elemente so approximieren lässt, dass der Einfluss der hochoszillierenden Koeffizienten in A^ε adäquat abgebildet wird, die aber mit akzeptablem Rechenaufwand verbunden sind.

Dazu hat es in der Vergangenheit sehr viele Untersuchungen gegeben. Die meisten der dort konstruierten Methoden sind rein heuristisch und liefern daher nur sehr selten, obgleich sie in Einzelfällen sehr gut zu funktionieren scheinen, eine Möglichkeit der mathematisch stringenten Legitimation; so stellt sich insbesondere die Frage, inwieweit die Methode eine Lösung liefert, deren Bezug zur Originallösung mathematisch quantifiziert werden kann.

1.3 Die Notwendigkeit einer speziellen Lösungsmethode

Im Folgenden wollen wir motivieren, warum Multiskalenprobleme überhaupt eine besondere Methodik zur Lösung benötigen. Wir wollen anhand eines sehr einfachen Modellproblems überprüfen und aufzeigen, inwieweit Probleme bei der Lösung der zugehörigen Gleichungen durch Finite Elemente auftreten und damit schon erste Anforderungen an diese besonderen Methoden stellen.

Zum Modellproblem lautet die schwache Formulierung: finde $u^\varepsilon \in H_0^1(\Omega)$ mit

$$(A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon, \nabla \phi) = (f, \phi) \quad \forall \phi \in H_0^1(\Omega). \quad (1.3)$$

Wir wählen einen endlich dimensionalen Teilraum $V_h \subseteq H_0^1(\Omega)$ und suchen somit $u_h^\varepsilon \in V_h$ mit

$$(A^\varepsilon \nabla u_h^\varepsilon, \nabla \phi) = (f, \phi) \quad \forall \phi \in V_h. \quad (1.4)$$

Sei nun $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ eine Basis von V_h . Dann gibt es $\eta_1, \dots, \eta_N \in \mathbb{R}$, so dass

$$u_h^\varepsilon = \sum_{i=1}^N \eta_i \varphi_i.$$

Wir suchen also nun $\eta_1, \dots, \eta_N \in \mathbb{R}$, so dass

$$\sum_{i,j=1}^N \eta_i (A^\varepsilon \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j) = \sum_{i=1}^N (f, \varphi_i), \quad (1.5)$$

was sich nun mit

$$a_{ij} := (A^\varepsilon \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j) \quad \text{und} \quad b_i = (f, \varphi_i)$$

als lineares Gleichungssystem $Ax = b$ formulieren lässt. Die Komponenten der Lösung x sind nun jene Basiskoeffizienten η_1, \dots, η_N , die die Funktion u_h^ε eindeutig bestimmen.

Wir wollen die Lösung der Modellgleichung mit stückweise polynomialen Funktionen approximieren. Sei hierzu $\{\tau_j\}_j$ eine Triangulierung von Ω mit inneren Gitterpunkten $\partial\Omega \not\supset \{p_i\}_{i=1, \dots, N}$. Wir wählen eine Basis $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ so, dass $\varphi_i|_{\tau_j} \in P_1$ für jedes τ_j und dass für jeden inneren Gitterpunkt gilt

$$\varphi_i(p_j) = \delta_{ij}.$$

Man rechnet leicht nach, dass dies eine Basis für Funktionen ist, die bezüglich der Triangulierung stückweise polynomial vom Grad 1 sind. Für jeden inneren Punkt (am Rand sind die Punkte durch die Forderung $u|_{\partial\Omega} = 0$ festgelegt) stellen wir nach obigem Schema das Gleichungssystem auf, dessen Lösungsvektor die Werte der Näherung u_h auf den Gitterpunkten beinhaltet.

Beispiel 1.2 *Wir wollen den obigen Ansatz zur Lösung des Modellproblems (1.2) mit $\varepsilon = 0.06$, verwenden, ohne die Mikroskala bei der Wahl von h zu berücksichtigen. Es sei die Lösung $u(x) = \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2)$ auf $\Omega = [0, 1]^2$ vorgegeben, so dass sich die rechte Seite f und der Fehler $e = u^\varepsilon - u_h^\varepsilon$ in der L^2 und Maximumnorm genau berechnen lassen. Weiterhin wählen wir $A^\varepsilon = A(x/\varepsilon)$ mit*

$$A(x) = \begin{pmatrix} p(x) & 0 \\ 0 & p(x) \end{pmatrix}, \quad p(x) = \begin{cases} p_1, & x \in [0, \frac{1}{2}] \times [0, \frac{1}{2}] \\ p_1, & x \in [\frac{1}{2}, 1] \times [\frac{1}{2}, 1] \\ p_2, & \text{sonst} \end{cases}$$

siehe auch Abb. 4.4.

Die Resultate sind in Abbildung 1.1 dargestellt. Auffällig sind die beiden stark nach unten abweichenden Stellen im Fehlerverlauf bei $h \approx 1/15$ und $h \approx 2/15$. Mit $\varepsilon \approx 1/15$ sind dies ungefähre ganzzahlige Vielfache von ε . Solche Phänomene werden daher als Resonanzeffekte bezeichnet.

An eine Methode zur numerischen Lösung von Multiskalenproblemen lassen sich mehrere Bedingungen formulieren:

1. Berechenbarkeit (endlich viel Speicherplatz),
2. mathematisch quantifizierbarer Unterschied zwischen Original- und Näherungslösung,
3. adäquater Übertrag qualitativer Eigenschaften des Ursprungsmodells, dazu

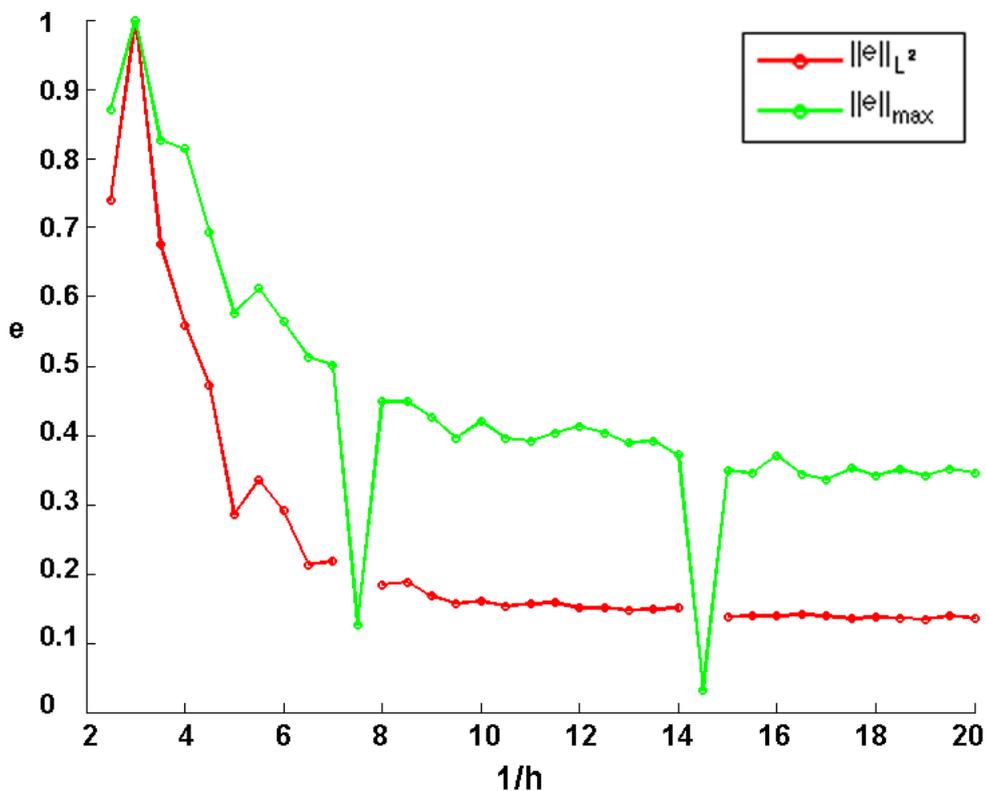


Abbildung 1.1: Naive Rechnung mit Standard Linearen Finiten Elementen für nicht konstante Koeffizienten. ($\varepsilon = 0.06$, siehe Beispiel 1.1) Resonanzeffekte und unregelmäßige Konvergenz sind zu beobachten.

- Übernahme der Effekte der Mikroskala in das neue Modell, oder
- neues (sog. *homogenisiertes*) Modell mit äquivalenten Eigenschaften.

Abhängig davon, auf welche dieser Bedingungen wir bei der Konstruktion einer Methode unser Hauptaugenmerk richten, entstehen verschiedene Verfahren. Bei der Methode, die aus numerischer Sicht am suggestivsten erscheint, wollen wir vor allem das Problem der zu großen Anzahl der Freiheitsgrade in den Griff bekommen. Diese Methode lässt die inhomogene Struktur des Problems in die Konstruktion der Basis der Finiten Elemente einfließen und wird in Kapitel 3 behandelt. Sie wird als Multiskalen Finite Elemente Methode (MsFEM) bezeichnet und kann als mathematisch stringente Version der in den Ingenieurwissenschaften beliebten Repräsentativen-Volumenelement-Methode angesehen werden, die wir in Kapitel 3 ebenfalls beschreiben.

Die MsFEM hat vor allem das Problem, dass sie die effektive Anzahl an Freiheitsgraden nicht senkt, sondern lediglich die Berechnung so durchführt, dass nicht alle Punkte zur gleichen Zeit gespeichert werden müssen.

Einen aus Sicht der Theorie der partiellen Differentialgleichungen natürliche-

ren Zugang zur Behandlung von Multiskalenproblemen liefert die Homogenisierungstheorie, bei der im Unterschied zur MsFEM die Gleichung mit inhomogenen Koeffizienten selbst durch eine sogenannte homogenisierte Gleichung ersetzt werden soll. Diese soll die qualitativen Eigenschaften des ursprünglichen Problems bewahren und einen mathematisch quantifizierbaren Bezug dazu liefern. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, dass durch die Ersetzung des Problems die Berechnung von Näherungslösungen des Modellproblems auf ein Verfahren mit Finiten Elementen für eine Gleichung mit konstanten Koeffizienten reduziert wird. Dies wird in Kapitel 4 diskutiert werden.

Kapitel 2

Gittergenerierung

Für die Anwendung der Methode der Finiten Elemente ist die Konstruktion einer passenden Triangulierung von entscheidender Rolle. In vielen Fällen, in denen sehr intensive Untersuchungen für ein und dasselbe Gebiet durchgeführt werden sollen, macht die quasi manuelle Konstruktion eines Gitters Sinn, da dieses (bis auf Verfeinerungen) nicht immer wieder verändert werden soll. In diesem Fall kann die Wahl eines Vierecksgitters sinnvoll sein, da es sich oft durch erheblich bessere Fehlerkonstanten auszeichnet.

Ein Nachteil von Vierecksgittern ist die beschränkte Möglichkeit, komplizierte Geometrien damit befriedigend aufzulösen, da der in den meisten Fällen krummlinige Rand nur schlecht approximiert werden kann. Der größte Nachteil besteht jedoch in der Tatsache, dass Vierecksgitter im Gegensatz zu Dreiecksgittern nicht ohne weiteres automatisch erzeugt werden können. Ein interessanter Ansatz hierzu besteht darin, aus einem bestehenden Dreiecksgitter ein Vierecksgitter zu erzeugen (sog. Q-Morph Algorithmus, [OSCS99]).

In vielen Fällen liegen die Anforderungen an das Gitter jedoch anders; will man etwa mit verschiedenen Gebieten arbeiten oder eine Softwarelösung für weniger spezialisierte Anwender anbieten, so hat die Generierung der Triangulierung vorzugsweise automatisch zu geschehen. Daher sind Algorithmen zur Gittergenerierung in der Mathematik schon seit längerer Zeit ein beliebtes Forschungsgebiet und zahlreiche Arbeiten sind dazu erschienen. Für einen Überblick über diesen Sachverhalt empfiehlt sich [Geo91].

Unser Ziel ist es, einen Gittergenerator zu konstruieren, der die folgenden Eigenschaften besitzt:

- einfache Implementierbarkeit,
- schnelle Gittererzeugung,
- flexible Deformation des Gitters unter Vorgabe von Dichtefunktionen,
- Triangulierung von komplizierten Geometrien.

Persson und Strang veröffentlichten 2004 eine Arbeit zu einem Programmpaket zur Gittergenerierung in Matlab, das uns als sehr gute Grundlage für weitere

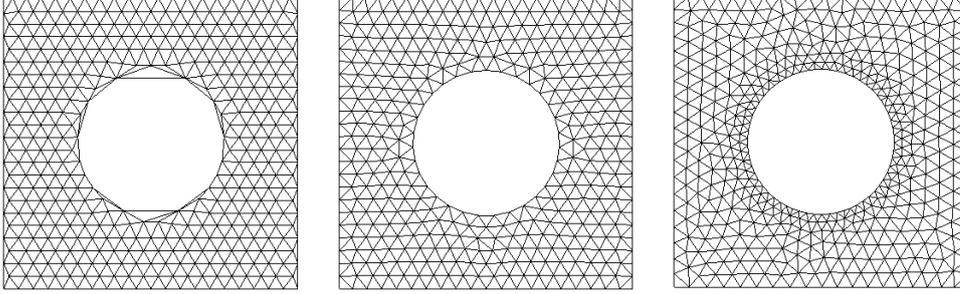


Abbildung 2.1: Links: die unveränderte Delaunay-Triangulierung einer gitterförmigen Punktemenge, Mitte: Ergebnis des Algorithmus bei konstanter Dichtefunktion, Rechts: Ergebnis des Algorithmus bei dichterem Verteilung am inneren Rand.

Entwicklungen in diesem Feld diente [PS04].

2.1 Repräsentation des Gebietes

Für die Arbeitsweise eines Gittergenerators ist es essentiell zu entscheiden, auf welche Weise das zu vernetzende Gebiet durch den Benutzer beschrieben werden soll. Viele Ansätze basieren hierbei auf der Darstellung des Randes des Gebietes, zum Beispiel durch einen Polygonzug oder durch Splines. Letzteres ist deshalb von Vorteil, weil es eine gute Schnittstelle zu den meisten CAD-Programmen bietet, welche in der Praxis meistens zur Konstruktion und Darstellung Anwendung finden. In unserem Fall wird ein Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ durch eine *Distanzfunktion* $d_\Omega : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$,

$$d_\Omega(x) = \begin{cases} -d(x, \partial\Omega), & x \in \overset{\circ}{\Omega}, \\ d(x, \partial\Omega), & x \notin \bar{\Omega}, \\ 0, & x \in \partial\Omega \end{cases} \quad (2.1)$$

definiert, wobei unter $d(\cdot, U) = \inf_{y \in U} \|\cdot - y\|$ der übliche Abstandsbegriff für eine Menge $U \subseteq \mathbb{R}^n$ zu verstehen ist. Diese Art der Gebietsbeschreibung hat sich als eine extrem flexible und meist einfache Vorgehensweise erwiesen, welche im Endeffekt auch relativ leicht um eine passende Schnittstelle zu den oben erwähnten häufigen industriellen Anwendungsformaten erweitert werden kann.

Beispiel 2.1 a. Für einen Kreis $B_1(0)$ ist

$$d_{B_1(0)}(x) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} - 1 = |x| - 1.$$

b. Für ein Rechteck $R_{p,q}$ mit linkem unteren bzw. rechtem oberen Eckpunkt (p_1, p_2) bzw. (q_1, q_2) ist

$$d_{R_{p,q}}(x) = -\min\{p_1 - x_1, q_1 - x_1, p_2 - x_2, q_2 - x_2\}.$$

c. Für das Beispiel aus Abbildung 2.1 ist

$$d_{\Omega}(x) = \max\{d_{R_{(-1,-1),(1,1)}}, -d_{B_{1/2}(0)}\}.$$

An diesen Beispielen wird erkennbar, dass sich auf eine solche Art zumindest schon einmal Objekte wie Kreise, Rechtecke und andere Geometrien mit einer implizit gegebenen Darstellung des Randes leicht beschreiben lassen; ebenfalls kann man Durchschnitte und Vereinigungen einfach umsetzen. Desweiteren besteht die Möglichkeit, Polygonegebiete durch Angabe der Eckpunkte zu definieren sowie eine für unsere späteren Zwecke sehr nützliche diskrete Darstellung über eine *Distanzmatrix*, die wir hier nun beschreiben wollen.

Sei $x = (x_1, \dots, x_N)$ eine Zerlegung des Intervalls (a_1, b_1) , $a_1 = x_1 < x_2 < \dots < x_N = b_1$ und $y = (y_1, \dots, y_M)$ analog eine Zerlegung des Intervalls (a_2, b_2) . Eine diskretisierte Form einer Distanzfunktion eines Gebietes $\Omega \subsetneq (a_1, b_1) \times (a_2, b_2)$ wird nun gegeben durch eine Matrix $A_d = (a_{ij}^d)_{ij}$, $i = 1, \dots, M$, $j = 1, \dots, N$, so dass wir die Distanzfunktion so auffassen, dass für die Punkte aus den Vektoren x und y gilt

$$d_{\Omega}((x_j, y_i)^T) = a_{ij}^d.$$

In den übrigen Punkten in $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2)$ ist d_{Ω} die Interpolation zwischen den gegebenen Werten der Matrix A_d . Das Tupel aus den beiden "Achsen" x und y und der Matrix A_d ist also als Rasterung des Rechtecks $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2)$ zu verstehen, in dem der Abstand zum Rand des Gebietes Ω in jedem Rasterpunkt in der Matrix A abzulesen ist. Das folgende Beispiel verdeutlicht die Funktionsweise.

Beispiel 2.2 Wir wollen einen Kreis $B_{0,6}(0)$ triangulieren. Wir werten dazu die Distanzfunktion $d_{B_{0,6}(0)}$ in den Punkten

$$x = y = (-1, -0.75, -0.5, -0.25, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)$$

aus und erhalten so eine Matrix A_d . Abbildung 2.2 illustriert die Vorgehensweise.

Die Größe der Distanzmatrix hat also einerseits Auswirkungen auf die Genauigkeit der Approximation des Gebietes, andererseits jedoch einen schnell wachsenden Einfluss auf die Rechenzeit, da für die Interpolation $N \cdot M$ Punkte herangezogen werden müssen.

2.2 Arbeitsweise des Gitteralgorithmus

An die Gittergenerierung selbst werden auch, je nach Art der Anwendung, unterschiedliche Anforderungen gestellt. Es ist uns wichtig, einen zugänglichen

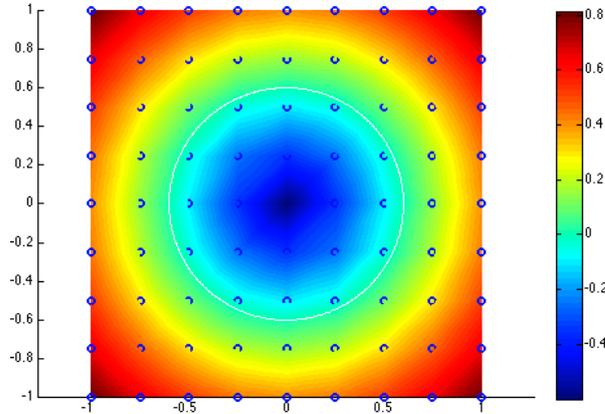


Abbildung 2.2: Generierung einer Triangulierung eines Kreises $B_{0.6}(0)$ mit der Distanzmatrix-Funktion. In Blau: Punkte, an denen die Distanzmatrix für die in Beispiel 2.2 gegebenen Punkte Werte angibt.

und flexiblen Algorithmus zu benutzen, der später für unsere Anforderungen leicht modifiziert werden kann.

Der hier vorgestellte Algorithmus benutzt eine iterative Technik, die auf der physikalischen Analogie zwischen Gittern und einer Fachwerkstruktur basiert: die Gitterpunkte sind hierbei die Verbindungen der einzelnen Stäbe, und unter der Vorgabe einer adäquaten Kraftverteilung in den Stäben in jeder Iteration lösen wir dies bis zu einem Gleichgewichtszustand auf. Am einfachsten kann man sich dies als eine Struktur von in den Gitterpunkten verbundenen (zunächst identischen) Federn vorstellen. Solche *kraftbasierten* Methoden zur Gittererzeugung wurden etwa von Bossen und Heckbert untersucht [BH96]. Diese sind jedoch nicht mit den sehr ähnlichen Methoden der Laplace-Glättung zu verwechseln [Fie88]. Wir wollen die Einzelheiten unserer Methode hier kurz beschreiben, mehr Details sind in [PS04] zu finden.

Im physikalischen Modell entsprechen die Kanten der Dreiecke Federn und die Punkte entsprechen Verbindungen dazwischen. Jede Feder habe eine Kraft-Dehnungs-Relation $f(l, l_0)$, welche von der aktuellen Ausdehnung l und der Ausdehnung im entspannten Zustand l_0 abhängt. Am Rand des Gebietes sollen externe Kräfte auf die Struktur entstehen, die in jedem Randpunkt orthogonal zum Rand seien; diese externen Kräfte seien gerade groß genug, die Punkte nicht aus dem Gebiet laufen zu lassen.

Wir wollen die Position der Knotenpunkte durch das Lösen eines statischen Kräftegleichgewichts bestimmen. Ziel ist es, für eine konstante Dichtefunktion ein Gitter mit möglichst gleichen Kantenlängen zu erhalten.

Für eine endliche Menge von Punkten in der Ebene liefert der DELAUNAY-ALGORITHMUS disjunkte Dreiecke mit den Punkten als Ecken, die die konvexe

Hülle der Punkte ausfüllen. Sei

$$p = \left\{ \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} x_N \\ y_N \end{pmatrix} \right\}$$

eine Liste, die alle Koordinaten der Knotenpunkte enthält. Wir definieren das Kraftfeld F in jedem Gitterpunkt p_i als die Summe aller Kräfte der an diesen Punkt zusammenlaufenden Kanten: im Punkt p_i treffen $m \in \mathbb{N}$ Kanten der aktuellen bzw. gewünschten Längen l_1, \dots, l_m bzw. $l_{0,1}, \dots, l_{0,m}$ zusammen. Seien $f_j(l_j, l_{0,j})$, $j = 1, \dots, m$ die zugehörigen Kraft-Dehnungs-Relationen. Wir definieren nun in jedem Punkt p das Kraftfeld F als die Summe aller dort zusammenlaufenden Kräfte:

$$F(p_i) = \sum_{j=1}^m f_j(l_j, l_{0,j}).$$

Um ein Kräftegleichgewicht zu erreichen, muss das System

$$F(p) = 0 \tag{2.2}$$

gelöst werden (p sind unsere Unbekannten). Hierzu überführen wir (2.2) in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen und setzen $p(0) = p_0$,

$$\dot{p} = F(p), \quad t \geq 0. \tag{2.3}$$

Wenn wir also eine stationäre Lösung von (2.3) finden, ist damit auch eine Lösung von (2.2) gefunden. Wir wollen diese DGL mithilfe des expliziten Eulerverfahrens lösen: für $\Delta t > 0$ sei $t_n = n\Delta t$ und

$$p_{n+1} = p_n + \Delta t F(p_n).$$

Man beachte, dass die Zeit t hier nur künstlich eingefügt wurde. Der Kernpunkt ist die Wahl der Funktion $f(l, l_0)$. Hierzu gibt es verschiedene Alternativen [BH96], [PS04]. Im einfachsten Fall modelliert die Funktion $f(l, l_0) = k(l_0 - l)$, $k > 0$ eine lineare Feder. In unserem Fall benutzen wir ein Federmodell, welches dieses lineare Modell für Abstoßung nutzt, jedoch keine anziehenden Kräfte erlaubt:

$$f(l, l_0) = \begin{cases} k(l_0 - l), & l < l_0 \\ 0, & l \geq l_0. \end{cases} \tag{2.4}$$

Die gewünschten Kantenlängen l_0 werden dem Algorithmus übergeben, im Falle gleichmäßiger Punkteverteilung sind diese konstant über alle Kanten. Die Federkonstante k kann hierbei beliebig (o.B.d.A. $k = 1$) gewählt sein.

Am Rand bewegen wir die Punkte, die außerhalb des Gebietes liegen, durch eine entsprechende Kraft wieder auf den nächsten Randpunkt. Diese Kraft ist orthogonal zum Rand und zwingt die Punkte nicht, auf dem Rand zu bleiben, sondern lediglich nicht hinaus zu laufen.

Bemerkung. Mit nichtlinearen Federmodellen wie $k = (l + l_0)/2l_0$ können je nach Anwendungsbereich bessere Ergebnisse erreicht werden. Neben dem erhöhten Aufwand hat man jedoch unter Umständen mit Stabilitätsproblemen bei der Lösung der DGL zu rechnen [BH96].

Algorithmus 2.3 (Distmesh-Algorithmus von Persson und Strang)

Eingangsdaten: Gewünschte (kleinste) Maschenweite h_0 , Rechteck $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \supseteq \Omega$, Distanzfunktion d_Ω , Dichtefunktion h_Ω (s.u.).

Ausgangsdaten: Punkteliste p , Liste der Dreiecke t .

1. Setze $n = 0$ und definiere regelmäßiges Raster $p_n = p_0$ der Gitterweite h_0 des Rechtecks $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$ und entferne alle Punkte mit $d_\Omega(x) > 0$. Bestimme gewünschte Kantenlänge l_0 aus h_0 ,
2. trianguliere p_n mithilfe des Delaunay-Algorithmus, berechne alle Kantenlängen l
3. bestimme $F(p_n)$ durch lineares Federmodell (2.4) durch Aufsummieren aller an den Punkt p grenzenden Kräfte,
4. mache einen Schritt des Eulerverfahrens $p_{n+1} = p_n + \Delta t F(p_n)$,
5. finde Punkte, die nun außerhalb des Gebietes liegen ($d_\Omega > 0$) und projiziere sie auf den Rand,
6. breche ab, falls jeder Punkt sich weniger als eine vorgegebene Toleranz bewegt hat oder setze $n \mapsto n + 1$ und wiederhole ab Schritt 2.

Bemerkung.

Es ist sinnvoll, im letzten Schritt zusätzlich eine Schranke für die maximale Anzahl an Iterationen anzugeben, da der Algorithmus im Allgemeinen nicht konvergiert. Dies ist zum Beispiel durch den großen Einfluss von Rundungsgrößen, etwa bei Benutzung einer Distanzmatrix als diskrete Distanzfunktion deutlich, wo in einigen Fällen der Toleranzbereich nicht durchbrochen wird. Eine einfache Ursache ist auf den Delaunay-Algorithmus zurückzuführen: man trianguliere das Einheitsquadrat durch zwei gleich große Dreiecke. Das optimale Gitter ist in diesem Fall nicht eindeutig, da ein schlichtes Setzen der beiden Diagonalen des Quadrates jeweils auf ein optimales Gitter führt (siehe Abb. 2.3).

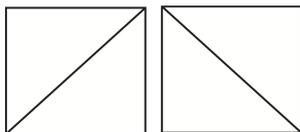


Abbildung 2.3: Fall einer nicht eindeutigen optimalen Triangulierung: der Delaunayalgorithmus springt zwischen den beiden optimalen Gittern hin und her; das Abbruchkriterium des Algorithmus 2.3 wird niemals erfüllt.

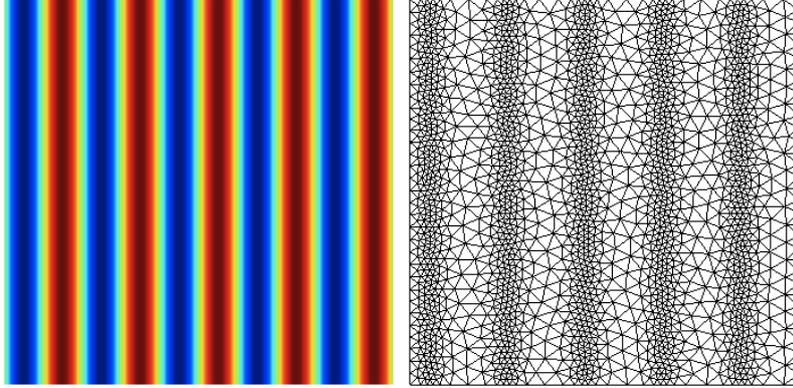


Abbildung 2.4: *Beispiel einer sinusförmigen Dichtefunktion auf dem Einheitsquadrat und resultierendes Netz.*

2.3 Nichtkonstante Dichtefunktionen

In den bisherigen Ausführungen haben wir eine konstante Dichtefunktion vorausgesetzt. Indem wir unser Federmodell (2.4) mithilfe einer Dichtefunktion $h_\Omega : \Omega \rightarrow (0, +\infty)$ skalieren,

$$f(l, l_0) = \begin{cases} h_\Omega(l_0 - l), & l < l_0 \\ 0, & l \geq l_0. \end{cases} \quad (2.5)$$

erhalten wir ein Gitter, welches in den Bereichen, in denen h_Ω klein ist, entsprechend feiner ist.

Wir benötigen nichtkonstante Dichtefunktionen zur besseren Auflösung komplizierter Geometrien (vgl. Abb. 2.10) oder für adaptive Verfahren (siehe Abschnitt 2.5).

Beispiel 2.4 *Im Beispiel von Abbildung 2.1 wurde im mittleren Bild eine konstante Dichte, im rechten jedoch*

$$h_\Omega(x) = \min\{4\|x\|_2 - 1, 2\}$$

gewählt.

In Abbildung 2.4 wurde

$$h_\Omega(x) = \sin(10\pi x_1)$$

gewählt.

2.4 Qualität der Gitter

Ein schwierige Frage bei der Generierung von Gittern ist die nach deren Qualität. Sicherlich ist die Antwort auf die Frage, wie *gut* ein Gitter ist, stark von

der Art der Anwendung abhängig.

Vom Standpunkt eines Entwicklers eines Gittergenerators, der zum Zeitpunkt der Entwicklung meist kein spezifisches Ziel hat, ist es daher schwierig zu entscheiden, wie die Qualität der generierten Gitter gemessen werden soll. Wie in sehr vielen Fällen der wissenschaftlichen Praxis ist das menschliche Empfinden von *Schönheit* oder *Harmonie* ein gutes Bewertungsmittel: Gitter, die vom Betrachter überwiegend als *schön* empfunden werden, stellen sich auch als für die meisten Anwendungen als *gut* heraus.

Ziel ist es, dieses Empfinden von Harmonie und Ausgewogenheit durch eine quantifizierbare Größe zu repräsentieren. Für den Großteil von Finite Elemente Rechnungen ist es von Nachteil, wenn ein Gitter benachbarte Elemente besitzt, die sich stark in der Größe unterscheiden. Eine möglichst gleiche Verteilung der Innenwinkel ist für die meisten Anwendungen auch von großem Vorteil. Dies lässt den Schluss zu, dass ein Gitter als besonders geeignet gelten darf, welches (im Fall konstanter Dichtefunktionen) nur aus gleichseitigen Dreiecken gleicher Größe besteht. Fehlerabschätzungen, in denen der Fehler einer Finite Elemente Lösung nach oben durch Terme beschränkt wird, die nur vom größten Innenwinkel des zugrunde liegenden Gitters abhängen, unterstützen diese Vermutung [Fie00].

Ein einfaches Qualitätsmaß, welches sowohl subjektiven Wahrnehmungen als auch den Forderungen der meisten Anwendungen in akzeptierbarem Maße gerecht wird, ist somit der Vergleich der Innen- und Außenkreise der Dreiecke: unterscheiden diese sich stark, so ist das Gitter weniger *gut* im Sinne unseres Bemessens. Für die *Qualitätszahl* eines Dreieckes mit den Seitenlängen a, b, c ,

$$q = 2 \frac{r_{\text{in}}}{r_{\text{out}}} = \frac{(b+c-a)(c+a-b)(a+b-c)}{abc}$$

gilt somit im Falle eines optimalen Dreiecks $q = 1$. Als eine Faustregel hat sich ergeben, dass ein Gitter als *gut* gelten darf, falls für alle Dreiecke $q > 0.5$ gilt [Fie00].

Numerische Tests zeigen, dass in den allermeisten Beispielen, in denen der Rand des Gebietes zumindest C^1 ist, die Qualitätszahl unserer erzeugten Gitter größer als 0.7 ist. Häufig und gerade bei nichthomogenen Gitterverteilungen macht es Sinn, die Verteilung der Qualitätszahlen zu betrachten, wie es in Abbildung 2.5 zu sehen ist. Verglichen mit der Methode der Laplaceglättung für die Äquilibration von Gittern, bei der bei vergleichbaren Gittern $q > 0.6$ zu beobachten ist (siehe[Fie00]), erweist sich unsere Methode also als eine effiziente Art, gute Gitter zu produzieren.

2.5 R-Adaptivität

Zur Steigerung der Genauigkeit einer Finite Elemente Approximation, ohne die Anzahl der Freiheitsgrade unnötig zu steigern, wird bei adaptiven Verfahren das Netz nur dort verfeinert, wo es nötig ist. Bei der h -Adaptivität wird die

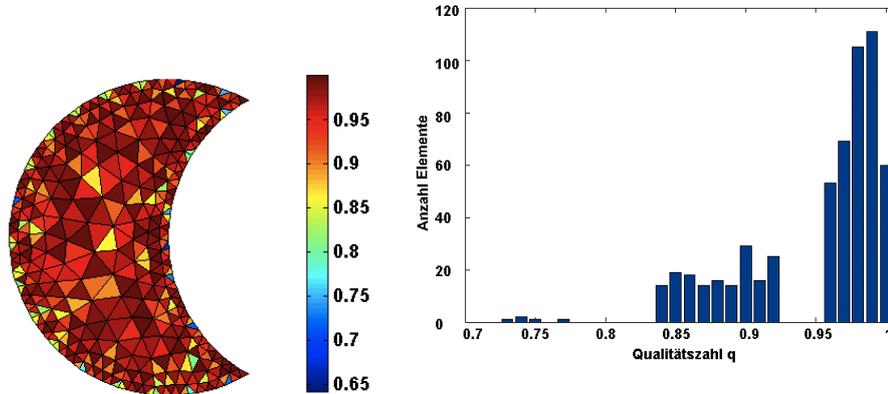


Abbildung 2.5: Qualitätsverteilung in einem Gitter mit einer zum Rand hin dichteren Knotenverteilung. Links: Gitter mit Einfärbung gemäß der Qualität der Elemente. Rechts: Verteilung der Qualitätszahlen

lokale Verfeinerung des Gitters durch eine Hinzunahme von Elementen vorgenommen, was durch die Zerlegung eines Elements in mehrere neue realisiert wird. Durch eine lokale a posteriori Fehlerabschätzung werden die Bereiche gekennzeichnet, in denen eine lokale Verfeinerung stattfinden soll.

Die Art und Weise, wie durch die Eingabe von Dichtefunktionen die Größenverteilung der Elemente in unserem Gittergenerator gesteuert werden kann, suggeriert ein anderes Vorgehen, welches als *R-Adaptivität* bekannt ist. Hierbei werden keine neuen Elemente erzeugt (oder bestehende gelöscht), sondern das Gitter unter Vorgabe einer Deformationsfunktion verzerrt. Ziel ist es, in durch einen geeigneten Fehlerschätzer designierten Bereichen ein dichteres Netz zu erhalten. In vielen Arbeiten wird hierzu ein aufwendiges Verfahren zur Verzerrung herangezogen, welches im Prinzip auf die Laplace-Glättung zurückzuführen ist [LA92], [GKT09]. Da uns von vornherein der Umgang mit einer Dichtefunktion in unserem Kräftemodell gegeben ist, ist uns auch ein natürlicher Zugang zur R-Adaptivität gegeben. Soll das Gitter anhand einer Fehlerfunktion $e : \Omega \rightarrow (0, +\infty)$ angepasst werden, so erhält man durch e selbst eine passende Dichtefunktion.

Algorithmus 2.5 (R-Adaptivität) Eingangsdaten: Rechteck $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \supseteq \Omega$, Distanzfunktion d_Ω , Dichtefunktion h_Ω bzw. Fehlerfunktion e , Liste der Elemente t und Liste der Koordinaten p .

Ausgangsdaten: neue Punktliste p , neue Liste der Dreiecke t .

1. trianguliere Ω mithilfe des Delaunay-Algorithmus, berechne alle Kantenlängen l und gewünschte Kantenlängen l_0 aus h_Ω ,
2. bestimme $F(p)$ durch das Federmodell (2.5) mit nichtkonstanter Dichtefunktion (vgl. Alg. 2.3),
3. mache einen Schritt des Eulerverfahrens $p_n \mapsto p_{n+1}$,

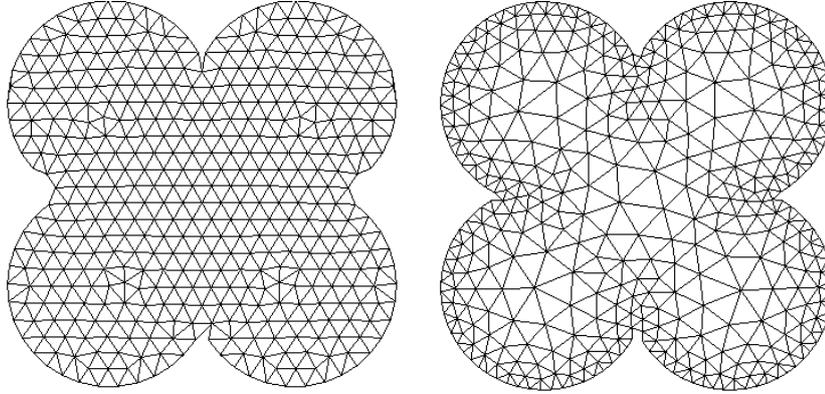


Abbildung 2.6: Nachträgliche R-Adaptivität bezüglich des Randes: durch feinere Auflösung am Rand kann möglicherweise eine bessere Approximation durch Finite Elemente (bei gleicher Anzahl der Freiheitsgrade) erwartet werden.

4. finde Punkte, die nun außerhalb des Gebietes liegen ($d_\Omega > 0$) und projiziere sie auf den Rand,
5. breche ab, falls jeder Punkt sich weniger als eine vorgegebene Toleranz bewegt hat oder wiederhole ab Schritt 1.

Beispiel 2.6 Mit linearen Finiten Elementen lösen wir die Gleichung

$$-\Delta u = f, \quad u|_{\partial\Omega} = 0$$

auf $\Omega = [0, 1]^2$ mit

$$f(x) = -16\pi^2 \sin(2\pi x_1) \sin(2\pi x_2).$$

Wie in Abb. 2.7 zu sehen ist, wird das zunächst gleichmäßige Gitter unter Angabe des (exakten) Fehlers verfeinert. Trotz gleicher Anzahl an Freiheitsgraden wird eine bessere Genauigkeit erreicht. Die Qualitätszahlen der Gitter lauten dabei $\min\{q\} = 0.61$ und Durchschnitt $\bar{q} = 0.99$ für das uniforme und $\min\{q\} = 0.58$ bzw. $\bar{q} = 0.94$ für das verzerrte Gitter.

Bemerkung. Es bleibt in obiger Ausführung noch sehr viel Spielraum für Versuche und Untersuchungen. So ist zum Beispiel a priori nicht klar, wie stark verfeinert werden sollte (evtl. Reskalierung der Dichtefunktion h_Ω .) oder wie schnell der Übergang zwischen großen und kleinen Elementen (zusätzlicher Exponent in der Dichtefunktion) sein sollte.

2.6 Anwendung: Generierung eines komplizierten Gitters aus realistischen Daten

Die schon vielfach erwähnte Flexibilität unseres Gittergenerators ließ die relativ einfache Umsetzung einer Prozedur zu, die wir im Folgenden kurz vorstellen

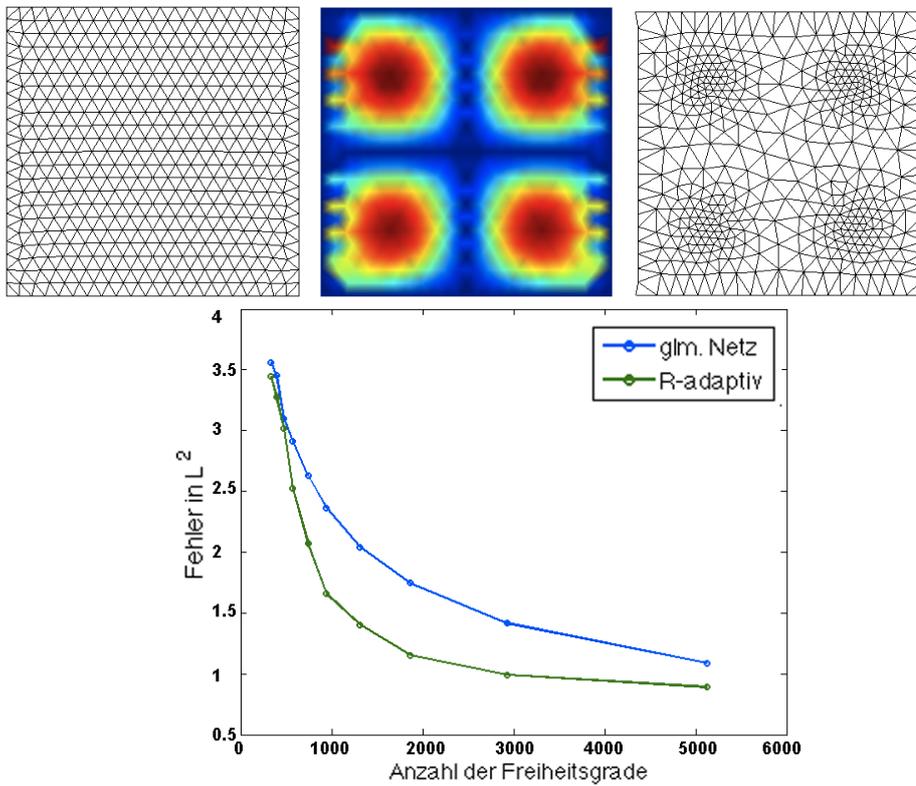


Abbildung 2.7: *R-Adaptives* Verfahren am einfachen Modellbeispiel. Das uniforme Netz (o.l.) wird durch Angabe des lokalen Fehlers (o.m.) verfeinert (o.r.). Eine Konvergenzstudie (u.) zeigt den quantitativ besseren Fehlerverlauf.



Abbildung 2.8: *Photo einer Record Ultra Torque Carbon Rennradkurbel*

wollen. Ein kompliziertes Gebiet zu triangulieren ist in der Regel eine schwierige Aufgabe. Meist ist das Gebiet nicht einfach in einer für den Gittergenerator geeigneten Form gegeben, sei es als implizite Darstellung oder Vereinigung von verschiedenen einfachen Mengen.

Wir wollen im Folgenden die (zweidimensionale Abbildung) einer Rennradkurbel triangulieren. Dabei haben wir davon lediglich ein gutes digitales Photo (Abb. 2.8 links). Nach eventueller Dekomprimierung (jpg etc.) ist dieses Photo durch drei Matrizen R , G und B der Größe der Auflösung $p \times q$ des Bildes gegeben. R , G und B beinhalten dabei Werte zwischen 0 und 1, die die Anteile der Farben Rot, Grün und Blau im jeweiligen Pixel wiedergeben. Ein Pixelpunkt i, j im Bild ist schwarz, wenn $r_{ij} = g_{ij} = b_{ij} = 0$ und weiß, wenn $r_{ij} = g_{ij} = b_{ij} = 1$ gilt. Wichtig für uns hierbei ist, dass der komplette Bereich, der später nicht im Gebiet liegen soll, komplett weiß zu sein hat. Dann ist es leicht, das Gebiet durch eine schwarze Menge zu repräsentieren, wie es in Abb. 2.8 rechts zu sehen ist. In diesem Fall ist das Bild also durch eine einfache Matrix $A \in \{0, 1\}^{p \times q}$ gegeben.

Ziel ist es nun, aus dieser Darstellung eine Distanzmatrix A_d zu gewinnen. Hierzu müssen wir zunächst den Rand des Gebietes identifizieren. Jedes schwarze Pixel im Bild, welches an ein weißes grenzt (eine 1 ist in A benachbart zu einer 0), wird hierbei in A_d durch eine 0 gekennzeichnet. Bei einer vorgegebenen Achsenskalierung $x \in [a_1, b_1]$, $y \in [a_2, b_2]$, welche den Seiten des Bildes entsprechen, kann nun zu jedem Punkt der geometrische Abstand zum Rand berechnet werden. Befindet sich dieser Punkt in einem schwarzen Bereich von A , wird dieser Abstand noch mit einem negativen Signum belegt. Auf diese Art erhalten wir schließlich die gewünschte Distanzmatrix A . Zur Vereinfachung dieses Prozesses haben wir in Matlab eine graphische Oberfläche geschaffen, die in Abbildung 2.9 die oben beschriebenen Schritte aufzeigt. Nach Erhalt dieser Distanzmatrix können die Schritte zur Netzgenerierung leicht durchgeführt werden. Abbildung 2.10 zeigt ein Beispiel eines fertigen, sich zum Rand leicht verfeinernden Gitters mit 3958 Knotenpunkten und die Verteilung der Qualitätszahlen. Hierbei ist $\bar{q} = 0.92$.

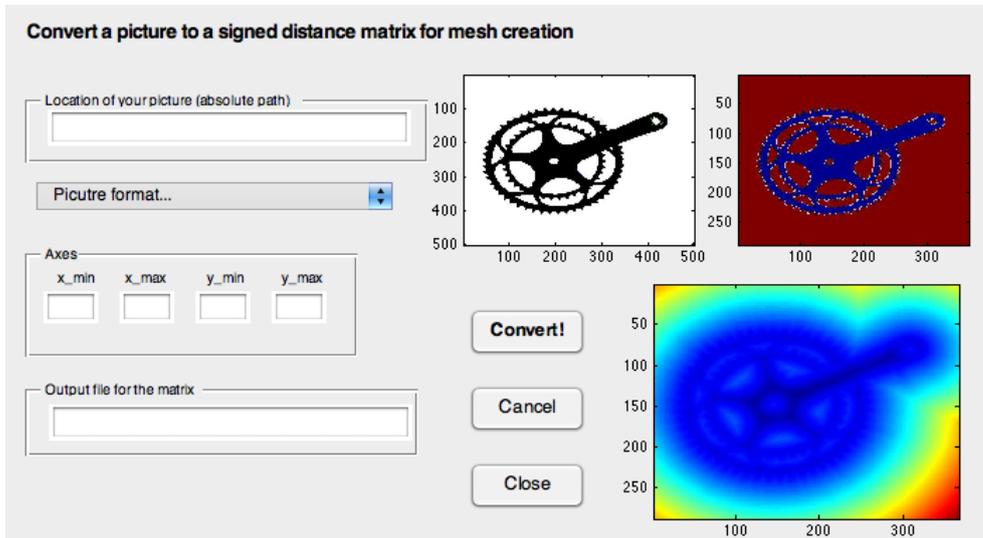


Abbildung 2.9: Umwandlung eines Bildes in eine Distanzmatrix. Rechts oben die Bereiche Innen, Außen und Rand. Rechts unten die (interpolierte) Darstellung der fertigen Distanzmatrix.

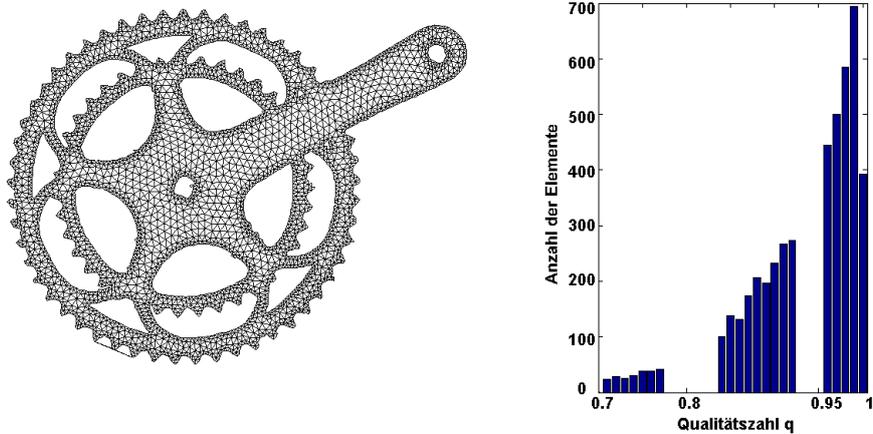


Abbildung 2.10: Fertiges Gitter in unserem Beispiel und Verteilung der Qualitätszahlen.

Bemerkungen.

1. Die Auflösung des Bildes entspricht der Größe der Distanzmatrix. Eine bessere Bildauflösung hat demnach eine größere Distanzmatrix und eine genauere Repräsentation des Bildes durch das fertige Gitter zur Folge, ergibt aber sehr schnell hohe Rechenzeiten.
2. Durch kleine Verunreinigungen im Bildmaterial können degenerierte Dreiecke entstehen, die durch einen Postprozess mithilfe der Qualitätszahlen (z.B. $q < 0.1$) leicht entfernt werden können.
3. Durch die Markierung von Randteilen auf dem s/w Bild mit Grundfarben (Rot, Grün, Blau) können Randelemente für die spätere Verwendung als z.B. Dirichlet- oder Neumannrand gekennzeichnet werden. Dies wird in Kapitel 5 genutzt werden.

Kapitel 3

Multiskalen Finite Elemente Methode

3.1 Erste heuristische Ansätze und Repräsentative-Volumenelement-Methode

An dieser Stelle wollen wir zunächst kurz aufzeigen, wie Multiskalenprobleme in der Vergangenheit ursprünglich gesehen wurden und welche Methoden sich bei den meisten Anwendern aus den Ingenieurwissenschaften teilweise bis heute durchgesetzt haben.

3.1.1 Erste einfache Ansätze

Die Notwendigkeit von besonderen Methoden zur Behandlung von Multiskalenproblemen wurde spätestens entdeckt, als sich die Menschen für den Einsatz von Verbundwerkstoffen, vornehmlich in Luft- und Raumfahrt, interessierten. 1973 verfassten Flaherty und Keller eine Arbeit über Elastizität von Verbundwerkstoffen, die bereits erste Züge späterer Techniken trug [FK73]. Diese Arbeit wurde im Umfeld der Raumfahrt- und Militärforschung der Vereinigten Staaten verfasst.

Die ersten Ansätze zur Lösung dieser Probleme, insbesondere in den Ingenieurwissenschaften betrieben, waren simple Mittelungstaktiken, bei denen die inhomogene Gleichung durch eine Gleichung ersetzt wurde, in der die Koeffizienten geeignete Mittelwerte enthielten. Natürlich stellt sich dabei direkt die Frage, was in diesem Fall *geeignet* bedeuten mag. Hierbei ist in der Regel der Standpunkt des Anwenders gefragt, und welche Größen ihm dabei wichtig sind; zum Beispiel mag ein Mechaniker sich in erster Linie bei einem (elastischen) Verformungsprozess um die korrekte Darstellung der Spannungen bemühen wollen.

Diese Ansätze hatten also gemeinsam, dass sie rein heuristisch waren. Bis heute hat sich in aller Regel und gerade im Umfeld der Ingenieurwissenschaften die sogenannte Repräsentative-Volumenelement-Methode durchgesetzt und viel-

fach bewährt, die im Folgenden beschrieben werden soll.

3.1.2 Das repräsentative Volumenelement

Am einfachsten lässt sich hierbei der Fall einer periodischen Inhomogenität erläutern. Hierbei sind die Koeffizienten in der Matrix A in (1.2) Q -periodisch vom Ort abhängig (siehe Definition 4.1). In diesem Fall entspricht das repräsentative Volumenelement (RVE) dem Referenz-Quader Q . Das Gebiet Ω ist hierbei periodisch zusammengesetzt aus verschobenen Quadern, wie es auch in Abbildung 4.1.1 zu sehen ist.

Der Ansatz besteht nun darin, die ursprüngliche Gleichung (1.2) durch eine *effektive* Gleichung zu ersetzen, in der die Koeffizienten konstant sind. Die Matrix A^ε ist also durch eine effektive Matrix A^* zu ersetzen, die in geeigneter Weise die Eigenschaften von A^ε konserviert. Dazu werden im RVE Q sämtliche Größen gemittelt:

- u sei der Mittelwert von u^ε in Q ,
- ξ sei der Mittelwert des Gradienten ∇u^ε in Q ,
- σ sei der Mittelwert von $A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon$ in Q ,
- e sei der Mittelwert von $A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \cdot \nabla u^\varepsilon$ in Q .

Wir suchen nun eine *effektive Matrix* A^* , für die gilt:

$$\sigma = A^* \xi, \quad e = A^* \xi \cdot \xi, \quad \xi = \nabla u. \quad (3.1)$$

Die RVE-Methode stellt also eine einfache Homogenisierungsmethode dar. Die Fragen an diese Methode sind nun:

- Existiert ein solches A^* ?
- Hängt es von ε, h, f, u und den Randwerten ab?
- Wie berechnet man A^* ?

Diese Fragen sind im Rahmen der RVE Methode in der Regel nicht zu beantworten. Im Allgemeinen stimmen die in (3.1) formulierten Gleichungen nicht; so ist beispielsweise für $u = \mu(u^\varepsilon)$ und $\xi = \mu(\nabla u^\varepsilon)$ i.A. $\nabla u \neq \xi$ und die Gleichung $\sigma = A^* \xi$ charakterisiert A^* nicht eindeutig. Zusätzliche Annahmen an die effektiven Größen müssen getroffen werden, die ihrerseits im Allgemeinen falsch sind (vgl. Kapitel 4).

Viele Anwendungen liefern zudem Gleichungen mit nicht periodischen Inhomogenitäten, zum Beispiel bei der Modellierung des Flusses durch ein poröses Medium. Hier ist der schwierigste Teil die Bestimmung des repräsentativen Volumenelements. Abbildung 3.1 zeigt einen Querschnitt durch die Oberfläche eines beschichteten Werkstückes auf Mikroebene. Es ist erkennbar, dass ein repräsentatives Volumenelement bereits hier sehr groß gewählt werden muss, um wirklich repräsentativ zu sein. Im Extremfall ist das repräsentative Volumenelement das ganze Gebiet und wegen der zu großen Anzahl an Knotenpunkten kann dieses nicht ausgewertet werden.

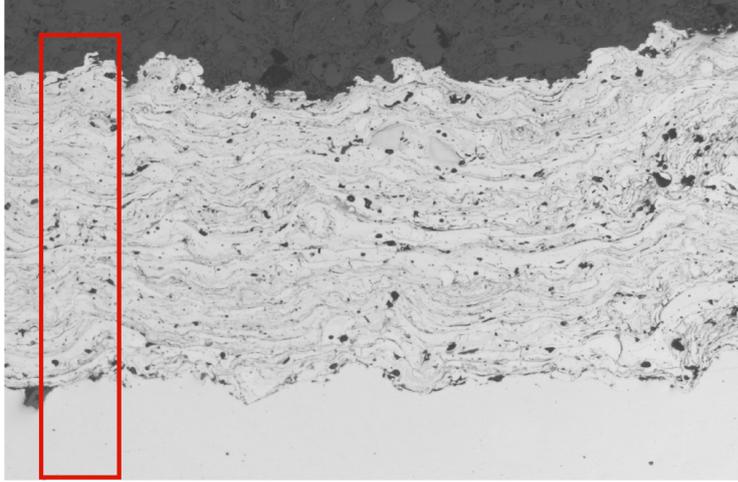


Abbildung 3.1: Querschnitt durch die Oberfläche eines beschichteten Werkstückes mit mikroskopischen Lufteinschlüssen. Hier muss das RVE (rotes Rechteck) vergleichsweise groß gewählt werden. [70810]

3.2 Die Multiskalen Finite Elemente Methode

Das Hauptproblem im Umgang mit Multiskalenproblemen besteht in der zu hohen Anzahl an Freiheitsgraden, die durch eine adäquate Triangulierung entstehen. Um dieses Problem zu umgehen, kann auf eine sequentielle Vorgehensweise zurückgegriffen werden, auf der die Idee der populären Multiskalen Finite Elemente Methode (MsFEM) beruht. Hierbei soll die mikroskopische Struktur in die Konstruktion der Basisfunktionen eingehen. Die Multiskalen Finite Elemente Methode (MsFEM) wird meistens mit Hou und Wu in Verbindung gebracht, die diese in ihrem Artikel [HW97] genau beschreiben.

3.2.1 Konstruktion

Definition 3.1 Sei Ω ein Gebiet und $\mathcal{T} = \{\tau_j\}_{j=1,\dots,N}$ eine Triangulierung von Ω mit Dreiecken und sei $\{\phi_1^0, \dots, \phi_N^0\}$ die Standardbasis (vgl. (1.5)) stückweiser linearer Polynome und $S_i = \text{supp}(\phi_i^0)$, $i = 1, \dots, N$. Die Multiskalen-Basisfunktionen ϕ_1, \dots, ϕ_N (vom Grad 1) sind die Lösungen der Gleichungen

$$\begin{cases} -\text{div } A^\varepsilon(x) \nabla \phi_i(x) = 0 & \text{in } \tau, \\ \phi_i = \phi_i^0 & \text{auf } \partial\tau \end{cases} \quad (3.2)$$

für alle $\tau \in \mathcal{T}$ mit $\tau \subseteq S_i$ und $i = 1, \dots, N$.

Die schwache Formulierung des Modellproblems (1.2) lautet: suche $u_h^\varepsilon \in V = H_0^1(\Omega)$, so dass

$$a^\varepsilon(u^\varepsilon, \phi) = (f, \phi) \quad \forall \phi \in V,$$

mit $a^\varepsilon(u, v) = \int_\Omega A^\varepsilon \nabla u \nabla v \, dx$. Mit den Basisfunktionen aus (3.2) lautet die MsFEM nun: finde $u^\varepsilon \in V_h$ mit

$$a^\varepsilon(u_h^\varepsilon, \phi_h) = (f, \phi_h) \quad \forall \phi_h \in V_h,$$

mit $V_h = \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_N\}$.

Bemerkung. Die MsFEM ist eine konforme Methode, d.h. $V_h \subseteq V$: die Gleichung (3.2) ist wohlgestellt in H^1 (vgl. (1.2) und [Eva10]) und $u_h^\varepsilon \in V_h \subseteq H^1$. \square

Für die praktische Umsetzung werden die Lösungen von (3.2) wieder mithilfe von linearen Finiten Elementen bestimmt. Die Vergitterung der einzelnen Zellen τ wird hierbei als *feine* oder *kleine Skala* bezeichnet, die Triangulierung von Ω selbst dementsprechend als *grobe* oder *große Skala*. Desweiteren bezeichnen wir

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &= \{\tau_j\}_{j=1, \dots, N} && \text{grobe Triangulierung,} \\ \mathcal{T}^0 &= \{\tau_j^0\}_{j=1, \dots, N^0} && \text{feine Triangulierung,} \\ &h && \text{(maximale) Maschenweite grobes Gitter,} \\ &h^0 && \text{(maximale) Maschenweite feines Gitter.} \end{aligned}$$

Abbildung 3.2.1 verdeutlicht diese Zusammenhänge.

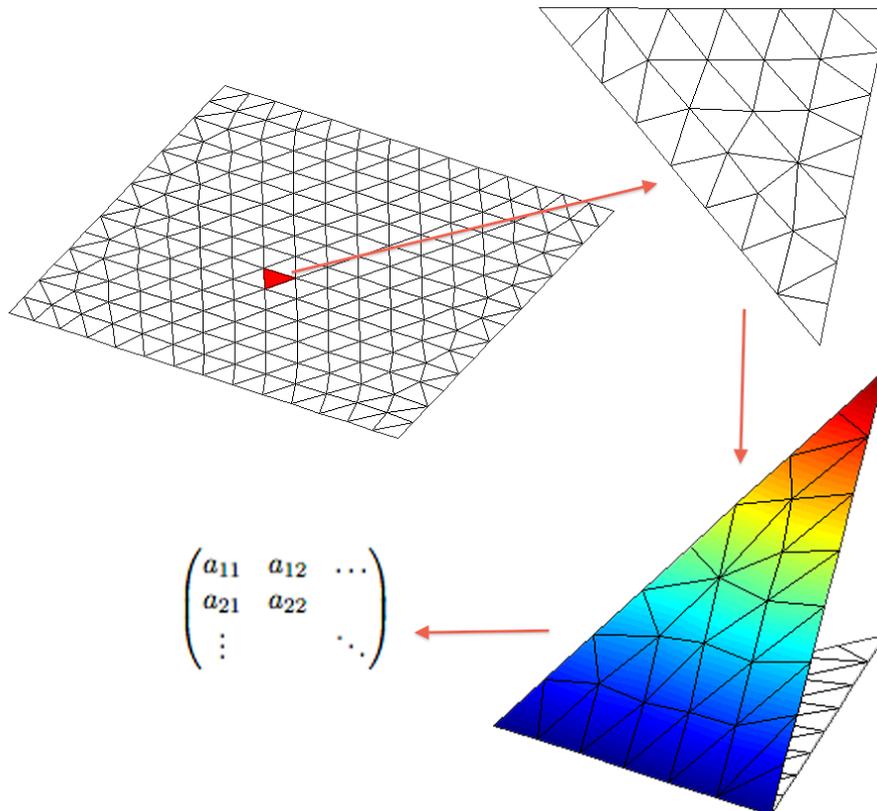


Abbildung 3.2: Schematischer Aufbau einer MsFEM.

An dieser Stelle wird auch deutlich, dass die effektive Anzahl an Knotenpunkten durch die MsFEM nicht reduziert wird; vielmehr wird die Berechnung sequentiell durchgeführt und somit das Problem des Speicherplatzes gelöst:

nachdem ein Integral a_{ij} und b_j berechnet wird, können die Informationen der feinen Skala auf dem betreffenden Element τ zunächst verworfen werden. Auch ist eine intelligentere Vorgehensweise bei der Assemblierung von A gefragt, um die Berechnung überhaupt möglich und zudem effektiv zu gestalten. Der folgende Algorithmus geht auf Hou und Wu [HW97] zurück.

Algorithmus 3.2 (MsFEM Algorithmus) Für alle $\tau_i \in \mathcal{T}$, $i = 1, \dots, N$:

1. Trianguliere τ_i mit feinem Gitter \mathcal{T}^0 ,
2. Für die Eckpunkte e_1, e_2, e_3 von τ_i und die Standard-Basisfunktionen $\phi_1^0, \phi_2^0, \phi_3^0$ mit $\text{supp}(\phi_j^0) \supseteq \tau_i$, $j = 1, 2, 3$ bestimme die Lösungen ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 von (3.2) mit Randbedingungen

$$\phi_j = \phi_j^0 \quad \text{auf } \partial\tau_i$$

durch Approximation mit linearen Finiten Elementen bzgl. \mathcal{T}^0 .

3. Berechne

$$\tilde{a}_{jk} = \int_{\tau_i} \nabla \phi_j(x) \nabla \phi_k(x) dx \quad j, k = 1, 2, 3$$

und

$$\tilde{b}_j = \int_{\tau_j} \phi_j(x) f(x) dx$$

durch geeignete numerische Integration,

4. Addiere die Einträge zur entsprechenden Stelle der Steifigkeitsmatrix A und der rechten Seite b .

Löse das LGS $Ax = b$.

3.2.2 Konvergenz der Methode

Im Gegensatz zur klassischen Finiten Elemente Methode für Probleme mit konstanten Koeffizienten muss bei der Konvergenz der MsFEM das Approximationsverhalten bezüglich der Diskretisierung h und der Homogenisierung ε diskutiert werden. Wir wollen ein wichtiges Resultat an dieser Stelle wiedergeben und am Modellproblem untersuchen, benötigen aber für den Beweis Techniken aus der Homogenisierungstheorie, die erst in Kapitel 4 eingeführt werden. Zunächst wollen wir den Einfluss von h^0 außer Acht lassen, d.h. die Basisfunktionen (3.2) seien exakt.

Satz 3.3 (Hou, Wu, 1996) Sei u^ε Lösung von (1.2) und u_h^ε die durch den Algorithmus 3.2 gewonnene MsFEM Approximation. Dann existieren $c_1, c_2 > 0$ mit

$$\|u^\varepsilon - u_h^\varepsilon\|_{H^1(\Omega)} \leq c_1 h \|f\|_{L^2(\Omega)} + c_2 \left(\frac{\varepsilon}{h}\right)^{1/2}, \quad \varepsilon < h. \quad (3.3)$$

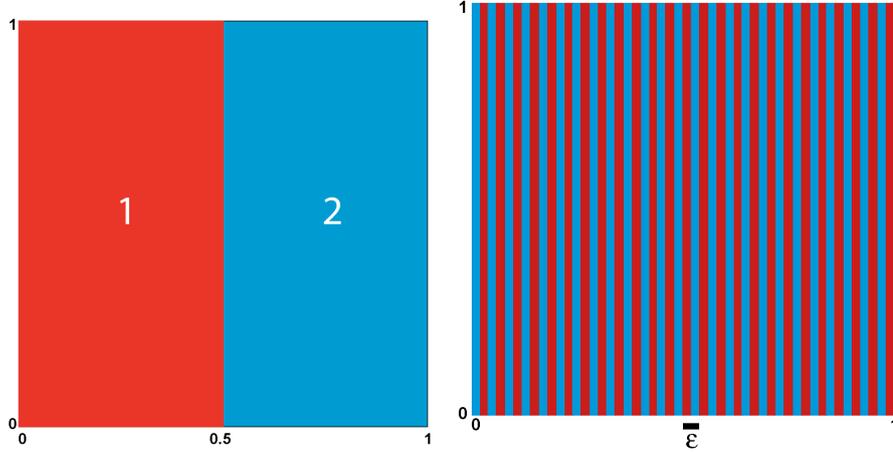


Abbildung 3.3: *Struktur der Elemente der inhomogenen Koeffizientenmatrix in unserem einfachen Modellproblem. Links: A auf dem Einheitsquadrat, rechts: A^ε .*

Mit einem Dualitätsargument kann aus (3.3) eine entsprechende L^2 -Abschätzung gewonnen werden:

$$\|u^\varepsilon - u_h^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} = O(h^2 + \frac{\varepsilon}{h}) \quad (3.4)$$

Folgerung. Für festes ε gibt es nach (3.3) eine optimale Maschenweite h ,

$$h_{\text{opt}} = \varepsilon^{1/3} c(\|f\|_{L^2(\Omega)})^{-2/3}. \quad (3.5)$$

3.2.3 Numerische Ergebnisse am einfachen Modellproblem

Die Funktionalität der MsFEM soll nun zunächst an einem sehr einfachen Modellproblem getestet werden. Insbesondere wollen wir die Existenz einer optimalen Gitterweite h erkennen können.

Sei $Q = [0, 1] \times [0, 1]$,

$$A = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix}, \quad p(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x_1 < \frac{1}{2} \\ 2, & \frac{1}{2} \leq x_1 < 1 \end{cases} \quad (3.6)$$

und

$$A^\varepsilon(x) = A(x/\varepsilon).$$

Die Multiskalen-Basisfunktionen werden mit linearen Finiten Elementen berechnet, wobei das aktuelle Element in situ von unserem Gittergenerierungsalgorithmus erzeugt wird. Da das Gebiet $\Omega = Q$ ebenfalls mit einem automatisch generierten Dreiecksgitter trianguliert wird und daher nicht von einer vollkommen regelmäßigen Struktur ausgegangen werden muss - wie es in späteren Anwendungen auf komplizierteren Geometrien auch notwendig sein wird

- erscheint es uns am sinnvollsten, die feine Gitterweite als relative Gitterweite $h_{\text{rel}}^0 = h^0 / \text{diam}(\tau)$ anzugeben.

Die Graphik 3.4 zeigt nun auf, dass ein qualitativer Verlauf wie in Satz 3.3 durchaus zu beobachten ist. Die beiden Kurven sind Konvergenzstudien für den H^1 -Fehler für $\varepsilon = 0.1$ (blaue Kurve) bzw. $\varepsilon = 0.01$ (grüne Kurve) zu sehen. Die optimale Maschenweite ist hier bei etwa $h = 0.05$ bzw. $h = 0.02$ zu suchen.

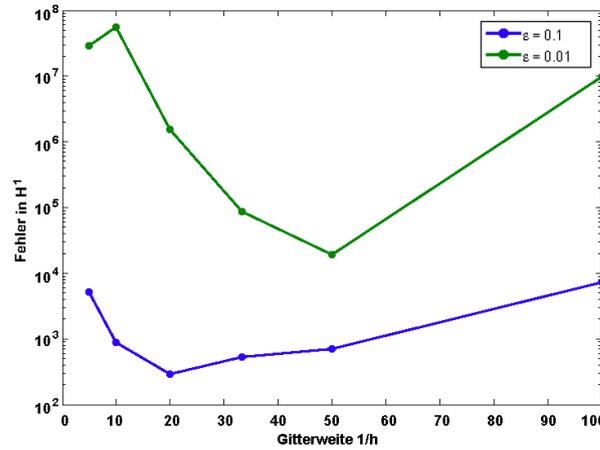


Abbildung 3.4: Fehlerverlauf für zwei MsFEM Approximationen für verschiedene ε . Die Existenz einer optimalen Maschenweite $h_{\text{opt}}(\varepsilon)$ ist erkennbar.

3.2.4 Vollständiges Konvergenzresultat und Bedingung an das feine Gitter

Auffällig in Abb. 3.4 ist, dass offenbar

$$\|u_h^{\varepsilon_1} - u^{\varepsilon_1}\|_{H^1(\Omega)} > \|u_h^{\varepsilon_2} - u^{\varepsilon_2}\|_{H^1(\Omega)}$$

für $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ gilt, was ein Widerspruch zu (3.3) zu sein scheint. In unserer Fehleranalyse haben wir jedoch die feine Skala h^0 außer Acht gelassen, worin die Erklärung zu finden ist. Das entsprechende Resultat ist bei Allaire und Brizzi 2005 erschienen [AB05].

Theorem 3.4 (Allaire, Brizzi 2005) *Seien u^ε Lösung von (1.2) und u_h^ε die MsFEM Lösung nach obigem Schema. Die Multiskalen Basisfunktionen (3.2) seien mit linearen Finiten Elementen mit Maschenweite h^0 approximiert. Dann existiert eine von ε und h unabhängige Konstante C , so dass*

$$\|u^\varepsilon - u_h^\varepsilon\|_{H^1(\Omega)} \leq C \left(h + \left(\frac{\varepsilon}{h} \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{h^0}{\varepsilon} \right) \right). \quad (3.7)$$

Für den Beweis werden Techniken der Homogenisierungstheorie benötigt. Dieser wird in Kapitel 4.2 diskutiert.

Die Ableitung der rechten Seite von (3.7) ist gegeben durch

$$v(\varepsilon) = C \left(\frac{1}{2}(\varepsilon h)^{-\frac{1}{2}} - \frac{h^0}{2\varepsilon^2} \right)$$

und charakterisiert deren Wachstumsverhalten. Somit gilt der folgende Satz.

Satz 3.5 (Bedingung an h^0) *Unter den Voraussetzungen von Theorem 3.4 fällt der Fehler $\|u^\varepsilon - u_h\|_{H^1(\Omega)}$ monoton für $\varepsilon \rightarrow 0$, falls die feine Skala h^0 die Bedingung*

$$h^0 < \frac{1}{2} \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{h^{\frac{1}{2}}} \quad (3.8)$$

erfüllt.

Für das Modellbeispiel zu Abbildung 3.4 bedeutet dies, dass mit den gewählten Werten, dass $h^0 < 7 \cdot 10^{-4}$ sein muss. Hier ist aber wegen $h_{rel} = 0.1 \cdot h$ stets $h^0 > 10^{-3}$, was die Beobachtungen erklärt. Die Rechenzeiten mit einem passenden h^0 hätten in diesem Fall jedoch den Rahmen gesprengt, weswegen auf eine an die Bedingung (3.8) angepasste Konvergenzstudie verzichtet werden musste.

3.2.5 Numerische Umsetzung der MsFEM

Bei der numerischen Umsetzung der MsFEM tauchen in den Details einige Schwierigkeiten auf, auf die in der Literatur meist nicht weiter eingegangen wird. Wir wollen hier kurz auf einige dieser Details eingehen, die Schwierigkeiten erläutern und unser Vorgehen im oben vorgestellten Beispiel aufzeigen.

a. Berechnung der Basiselemente

Die Hauptschwierigkeit bei der Berechnung der Multiskalen Basiselemente liegt in der Triangulierung der Elemente des groben Gitters. Analog zum Vorgehen bei der gewöhnlichen FEM und wie in Algorithmus 3.2 erkennbar ist es sehr zweckdienlich, anstelle einer knotenbasierten Strategie die Hauptschleife des Algorithmus über die Elemente des groben Gitters laufen zu lassen. Dies bedeutet, dass man auf jedem Gitterelement drei Anteile zur Steifigkeitsmatrix zu berechnen hat, da zu jedem Element drei Basisfunktionen gehören, deren Träger mit dem jeweiligen Element einen nichtleeren Schnitt hat.

Wie bereits erwähnt, erzeugen wir die Gitter zur Berechnung dieser Basiselemente erst in dem Moment, in dem wir diese benötigen, um nach der Berechnung der Anteile zur Steifigkeitsmatrix alle Informationen auf der feinen Skala zu verwerfen.

b. Ableitung der Basiselemente

Im Zuge der Realisierung der MsFEM hat sich der geschickte Umgang mit den Ableitungen der Basisfunktionen als äußerst wichtig erwiesen. Für die Berechnung der Einträge zu Steifigkeitsmatrix ist bekanntlich die Bilinearform

$$(u, v)_a = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx$$

auszuwerten, welche Ableitungen der Funktionen beinhaltet. In unserem Fall sind diese Funktionen die Multiskalen Basisfunktionen, die auf jedem Element der groben Triangulierung ihrerseits durch eine Finite Elemente Approximation mit stückweise linearen Elementen gegeben ist. Da für eine stückweise lineare Funktion die Ableitung auf den Kanten und Punkten der (feinen) Triangulierung nicht definiert sind, ist eine besondere Vorgehensweise angebracht, die als *Recovery-Methode* bekannt ist [ZLN04]. Bei dieser Methode definiert man eine *Recovery-Ableitung* auf den inneren Punkten durch ein gewichtetes Mittel der Ableitungen auf den umliegenden Elementen.

Sei (x_i, y_i) ein Gitterpunkt der Triangulierung \mathcal{T} mit umliegenden Dreiecken T_1, \dots, T_m und $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ bezüglich \mathcal{T} stückweise linear. In T_j sind die Ableitungen $Du(x)|_{T_j} =: D_j, j = 1, \dots, m$ konstant. Dann definieren wir zu (x_i, y_i)

$$z_i = \frac{\sum_{j=1}^m D_j |T_j|}{\sum_{j=1}^m |T_j|} \in \mathbb{R}^2.$$

Damit erhalten wir zu jedem Knotenpunkt gemittelte Richtungsableitungen. Für jeden Punkt $p \in \Omega$, der nicht Knotenpunkt ist, erhalten wir nun die Recoveryableitung durch eine geeignete Interpolation dieser Werte z_i . Der Grad der Interpolation ist hierbei unter anderem von der Anzahl der Knotenpunkte abhängig, mindestens aber stückweise linear.

Es lässt sich zeigen, dass eine so konstruierte Recoveryableitung gegen die Ableitung des kontinuierlichen Problems mit einer besseren Ordnung konvergiert als die eigentliche Ableitung Du_h [LZ84].

c. Fehlerberechnung

Für die numerische Analyse des Verfahrens ist die Berechnung des Fehlers $\|u - u_h\|$ in bestimmten Normen notwendig. Üblicherweise sind dies bei Problemen dieser Klasse die L^∞ -, die L^2 - und die H^1 -Norm. Wir wollen die Probleme bei der Auswertung dieser Fehlernorm für die MsFEM anhand der Berechnung der L^2 -Norm verdeutlichen.

Sei $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine uns bekannte Lösung von (1.2) und u_h eine MsFEM Näherungslösung dazu. Zur Berechnung der Norm

$$\|u - u_h\|_{L^2} = \left(\int_{\Omega} |u(x) - u_h(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

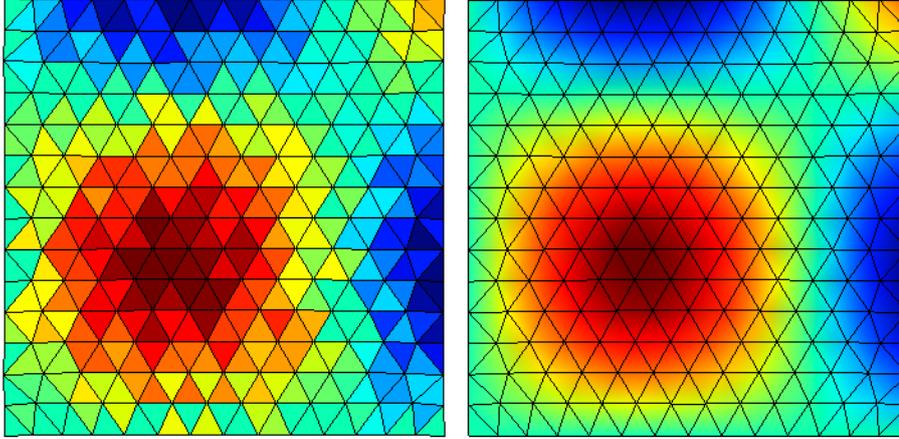


Abbildung 3.5: *Illustration einer Recovery-Ableitung. Links: Stückweise auf den Zellen definierte konstante Ableitung, rechts: Recovery-Ableitung*

ist die Funktion $(u - u_h)(x)$ auszuwerten. Zu diesem Zeitpunkt sind die Informationen über die feine Triangulierung \mathcal{T}^0 jedoch bereits verworfen. Wir erinnern daran, dass es sich bei u_h nicht um eine stückweise lineare Funktion handelt. Bezüglich der MsFEM-Basis $\{\phi_1, \dots, \phi_N\}$ hat u_h die Darstellung $u_h = \sum_{i=1}^N \mu_i \phi_i$ mit $\mu_1, \dots, \mu_N \in \mathbb{R}$. Diese Koeffizienten μ_i sind die Informationen, die nach Beendigung der Methode bekannt sind.

Die feine Triangulierung und die Berechnung der MsFEM-Basisfunktionen (Schritt 1 und 2 im MsFEM Algorithmus 3.2) sind also zu wiederholen.

Bis auf die Berechnung der (Recovery-) Ableitungen und das Lösen des Gleichungssystems ist der Aufwand der Berechnung des Fehlers also vergleichbar mit dem Aufwand der Berechnung der MsFEM-Lösung u_h selbst.

Diese Schritte sind jeweils notwendig, sobald eine Auswertung von u_h außerhalb der Knoten der groben Triangulierung gefordert wird.

Algorithmus 3.6 (Fehlerberechnung MsFEM) Für alle $\tau_i \in \mathcal{T}$, $i = 1, \dots, N$:

1. Trianguliere τ_i mit feinem Gitter \mathcal{T}^0 ,
2. Für die Eckpunkte e_1, e_2, e_3 von τ_i und die Standard-Basisfunktionen $\phi_1^0, \phi_2^0, \phi_3^0$ mit $\text{supp}(\phi_j^0) \subseteq \tau_i$, $j = 1, 2, 3$ bestimme die Lösungen ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 von (3.2) mit Randbedingungen

$$\phi_j = \phi_j^0 \quad \text{auf } \partial\tau_i$$

durch Approximation mit linearen Finiten Elementen bzgl. \mathcal{T}^0 .

3. Berechne

$$\int_{\tau_i} |u(x) - u_h(x)|^2 dx$$

durch geeignete numerische Integration.

4. Verwerfe Daten zu τ_i .

Berechne

$$\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)} \approx \left(\sum_{i=1}^N \int_{\tau_i} |u(x) - u_h(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

Im Falle unseres Modellproblems ist u_h bezüglich der feinen Triangulierung stückweise linear. Wir werten die Integrale mit der Mittelpunktsregel aus:

$$\int_{\tau_i} f(x) dx = \sum_{j=1}^M f(s_j) |\tau_j^0|,$$

wobei s_j die Schwerpunkte der Dreiecke der feinen Triangulierung τ_j^0 von τ_i bezeichnen, $j = 1, \dots, M$. Für stückweise lineare Funktionen f ist diese Quadratur exakt.

d. Zur Parallelisierbarkeit in der MsFEM

Die Methode der MsFEM ist sehr leicht parallelisierbar. Bei der Assemblierung der Steifigkeitsmatrix können die Bestimmungen der Multiskalen Basiselemente vollkommen unabhängig voneinander vorgenommen werden. Bei der Parallelisierung kommt es zudem zu keinerlei Kommunikation zwischen den Prozessen. Es liegt also ein großer Geschwindigkeitsvorteil vor, da der Hauptteil der Rechenzeit der gesamten MsFEM bei der Assemblierung der Steifigkeitsmatrix zu suchen ist.

Kapitel 4

Homogenisierung

Nachdem wir uns bei der Multiskalen Finite Elemente Methode vorrangig auf das Lösen des Problems der zu vielen Unbekannten einer der Oszillation adäquaten Triangulierung konzentriert haben, wollen wir nun einen anderen Ansatz wählen. Die ursprüngliche inhomogene Gleichung soll nun durch eine neue, homogenisierte Gleichung ersetzt werden, bei der die Koeffizienten konstant sind.

In diesem Zusammenhang stellen sich viele Fragen. Zunächst fragen wir uns, wie diese homogenisierte Gleichung überhaupt aussieht. Dann wird es uns wichtig sein, den Zusammenhang zwischen inhomogener und homogenisierter Gleichung zu beschreiben; insbesondere werden wir einen dazu passenden Konvergenzbegriff einführen.

Darauf bemühen wir uns um die Feinheiten der numerischen Umsetzung dieser Theorie und führen Tests durch.

Schließlich wird es um die sehr wichtige Frage gehen, wie weit die (numerische) Lösung der homogenisierten Gleichung weiter korrigiert werden kann, so dass die Effekte der Oszillationen auf der Mikroskala noch besser repräsentiert werden. Hierbei werden wir insbesondere erforschen, woher bei einem Homogenisierungsprozess der Fehler am stärksten einfließt.

4.1 Theorie der Homogenisierung

Die Grundidee der Homogenisierung ist es, eine Gleichung

$$L^\varepsilon u^\varepsilon = 0$$

mit einem von einem kleinen Wert ε abhängenden Operator L^ε auf ihr Verhalten für $\varepsilon \rightarrow 0$ zu untersuchen. Genau genommen können wir hier von einer *Familie von Gleichungen* sprechen. Dies ist sehr wesentlich für das Verständnis der Homogenisierung und auch der größte Unterschied zu den heuristischen Methoden, die wir in Kapitel 3 beschrieben haben. Die Ausführungen in diesem Abschnitt richten sich stark nach [CD99].

4.1.1 Grenzwerte stark oszillierender Funktionen

Wir wollen uns nun zunächst mit Grenzwerten von stark oszillierenden Funktionen beschäftigen, die eine wichtige Rolle in der Homogenisierungstheorie spielen. Uns interessieren dabei vor allem Funktionen der Form

$$u^\varepsilon = u\left(\frac{x}{\varepsilon}\right),$$

wobei u eine periodische Funktion ist und $\varepsilon > 0$ Werte in einer Nullfolge annimmt.

Definition 4.1 Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Gebiet. Eine Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ heißt periodisch bzgl. Q , falls ein Rechteck $Q = [a_1, b_1] \times \dots \times [a_n, b_n]$ in Ω existiert, so dass für jedes $N \in \mathbb{N}^n$ und jede Abbildung der Form

$$T_N : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad T_N(x) = \begin{pmatrix} x_1 - N_1(b_1 - a_1) \\ \vdots \\ x_n - N_n(b_n - a_n) \end{pmatrix}$$

gilt

$$(f \circ T_N)(x) = f(x).$$

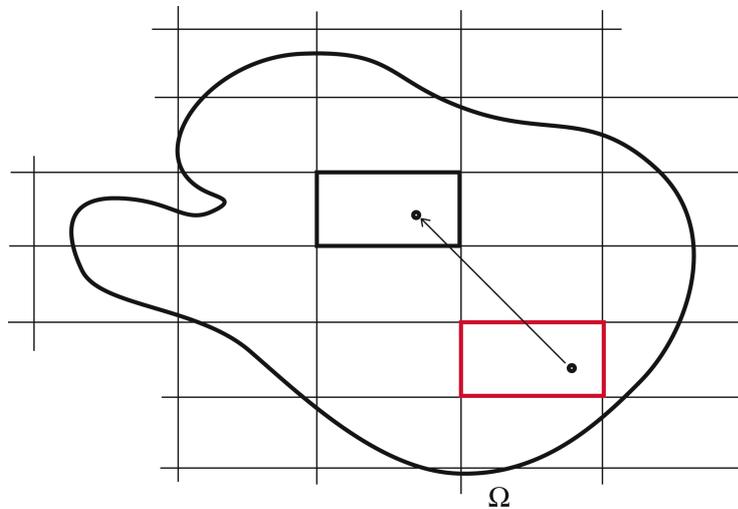


Abbildung 4.1: Illustration des Referenzelements einer periodischen Funktion

Beispiel 4.2 Es sei $v(x) = \sin(2\pi x)$ und $v^\varepsilon = v(x/\varepsilon)$, $x \in [a, b]$. Man sieht leicht ein, dass v^ε für $\varepsilon \rightarrow 0$ nicht fast überall konvergieren kann. Da jedoch $\|v^\varepsilon\|_{L^2}$ unabhängig von ε beschränkt ist und

$$\int_{a_1}^{b_1} v^\varepsilon(x) dx \rightarrow 0 \quad \forall a_1, b_1 \text{ mit } [a_1, b_1] \subseteq [a, b]$$

gilt nach dem Satz von Riemann-Lebesgue

$$v^\varepsilon \rightharpoonup 0 \quad \text{schwach in } L^2([a, b]), \varepsilon \rightarrow 0 \quad (4.1)$$

Beispiel 4.3 Sei v die 2-periodische Funktion, die auf $(0, 2)$ definiert ist durch

$$v(x) = \begin{cases} \alpha & x \in (0, \frac{2}{3}) \\ \beta & \text{sonst.} \end{cases}$$

mit $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $\alpha \neq \beta$. Wie oben wählen wir $v^\varepsilon = v(x/\varepsilon)$. Auch hier kann v^ε nicht fast überall konvergieren. Analog zum vorigen Beispiel lässt sich zeigen, dass

$$v^\varepsilon \rightharpoonup v^* = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{3}\alpha + \frac{4}{3}\beta \right) \quad \text{schwach in } L^2(0, 2), \varepsilon \rightarrow 0. \quad (4.2)$$

Diese Beispiele sind insbesondere deshalb interessant, da wir in beiden Fällen erkennen können, dass die oszillierenden Funktionen schwach gegen ihre Mittelwerte konvergieren. Dies lässt sich in folgendem Satz allgemein fassen.

Satz 4.4 Sei $1 \leq p \leq \infty$ und f eine Q -periodische Funktion in $L^p(Q)$. Wir setzen $f^\varepsilon(x) = f(x/\varepsilon)$ fast überall auf \mathbb{R}^n . Dann gilt für $p < +\infty$ und $\varepsilon \rightarrow 0$

$$f^\varepsilon \rightharpoonup \mu_Q(f) = \frac{1}{|Q|} \int_Q f(y) dy \quad \text{schwach in } L^p(\Omega) \quad (4.3)$$

für jede offene beschränkte Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$.

Falls $p = +\infty$, gilt

$$f^\varepsilon \rightharpoonup \mu_Q(f) \quad \text{schwach}^* \text{ in } L^\infty(\mathbb{R}^n) \quad (4.4)$$

BEWEIS. Siehe [CD99].

Folgerung. Sei E ein Banachraum. Dann folgt aus Satz 4.4, dass für zwei Folgen $(u^\varepsilon) \subseteq E$ und $(v_\varepsilon) \subseteq E'$ mit

$$u^\varepsilon \rightharpoonup u \text{ schwach in } E \text{ und } v_\varepsilon \rightharpoonup v \text{ schwach in } E'$$

im Allgemeinen gilt

$$\langle u^\varepsilon, v_\varepsilon \rangle_{E, E'} \not\rightarrow \langle u, v \rangle_{E, E'}.$$

BEWEIS. Seien f, g zwei Y -periodische Funktionen in $L^2(Y)$ und

$$u^\varepsilon(x) = f(x/\varepsilon), \quad v_\varepsilon(x) = g(x/\varepsilon)$$

f.ü. auf \mathbb{R}^n . Nach Satz 4.4 ist

$$u^\varepsilon v_\varepsilon \rightharpoonup \mu_Y(fg)$$

und

$$u^\varepsilon \rightharpoonup \mu_Y(f) \text{ und } v_\varepsilon \rightharpoonup \mu_Y(g).$$

Nach Beispiel 4.3 (wähle $f = g = v_\varepsilon$ für ein festes ε) ist jedoch

$$\mu_Y(fg) \neq \mu_Y(f)\mu_Y(g).$$

□

4.1.2 Periodische Funktionen

Der Begriff der Periodizität ist für das Folgende von zentraler Bedeutung. Deshalb soll Periodizität zunächst auf Sobolevräume übertragen werden. Sei Q ein Quader im \mathbb{R}^n , o.B.d.A. sei $Q = (0, 1)^n$.

Definition 4.5 Sei $C_{\text{per}}^\infty(Q)$ die Teilmenge von $C^\infty(\mathbb{R}^n)$ der Q -periodischen Funktionen. Wir bezeichnen mit $H_{\text{per}}^1(Q)$ bzw. $L_{\text{per}}^2(Q)$ die Vervollständigung von $C_{\text{per}}^\infty(Q)$ unter der H^1 - bzw. L^2 -Norm.

Bemerkungen. 1. Sei $u \in H_{\text{per}}^1(Q)$. Dann hat u dieselbe Spur auf zwei gegenüberliegenden Seiten des Rechtecks Q .
2. Sei $u \in H_{\text{per}}^1(Q)$ und $u^\#$ die Erweiterung von u , die durch

$$u^\#(x + ke_i) = u(x) \quad \text{f.ü. auf } Q, \quad \forall k \in \mathbb{Z}, \forall i \in \{1, \dots, n\}$$

definiert ist, wobei $\{e_1, \dots, e_n\}$ die kanonische Basis von \mathbb{R}^n ist. Dann ist $u^\#$ in $H^1(\Omega)$ für jede beschränkte offene Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$.

Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen können für Probleme mit periodischen Randbedingungen im Allgemeinen nur bis auf eine additive Konstante gelten (siehe Abschnitt 4.1.5). Dazu benötigen wir die folgende Definition.

Definition 4.6 Sei

$$W_{\text{per}}(Q) = H_{\text{per}}^1(Q)/\mathbb{R}$$

der Raum der Äquivalenzklassen zur Relation $u \equiv v \Leftrightarrow u - v = \text{const.}$ Durch \dot{u} sei die Äquivalenzklasse, die durch u repräsentiert wird, bezeichnet.

Lemma 4.7 Durch

$$\|\dot{u}\|_{W_{\text{per}}(Q)} = \|\nabla u\|_{L^2(Q)}, \quad \forall u \in \dot{u}, \dot{u} \in W_{\text{per}}(Q)$$

ist eine Norm auf $W_{\text{per}}(Q)$ erklärt. Weiterhin kann der Dualraum $(W_{\text{per}}(Q))'$ mit

$$\{F \in (H_{\text{per}}^1(Q))' \mid F(c) = 0 \forall c \in \mathbb{R}\}$$

identifiziert werden.

BEWEIS. Die Normeigenschaften lassen sich leicht nachrechnen. Damit folgt aus dem Rieszschen Darstellungssatz [LL00] die Behauptung. \square

4.1.3 Das Modellproblem

In diesem Abschnitt führen wir die Rahmenbedingungen unseres Modellproblems detailliert ein, mit welchem wir im Folgenden arbeiten wollen.

Sei fortan stets

$$A^\varepsilon \in M(\alpha, \beta, \Omega)$$

eine Folge nichtkonstanter Matrizen (siehe Definition 1.1). Des Weiteren sei $f \in H^{-1}(\Omega)$. Damit formulieren wir unser *Modellproblem*

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) = f & \text{in } \Omega \\ u^\varepsilon = 0 & \text{auf } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.5)$$

Nach dem Satz von LAX-MILGRAM existiert für jedes $\varepsilon > 0$ eine eindeutige schwache Lösung von (4.5), so dass gilt

$$\|u^\varepsilon\|_{H^1(\Omega)} \leq \frac{1}{\alpha} \|f\|_{H^{-1}(\Omega)}, \quad (4.6)$$

mit α unabhängig von ε . Wegen der Äquivalenz von Kompaktheit und Folgenkompaktheit und (4.6) existiert eine Teilfolge $u^{\varepsilon'}$ und ein $u^0 \in H_0^1(\Omega)$, so dass

$$u^{\varepsilon'} \rightharpoonup u^0 \quad \text{schwach in } H_0^1(\Omega) \quad (4.7)$$

Man beachte, dass der Grenzwert u^0 zunächst von der Auswahl der Teilfolge ε' abhängt. Zu diesem Zeitpunkt stellen sich zwei Fragen:

1. Erfüllt u^0 ein Randwertproblem auf Ω ?
2. Falls ja, ist u^0 eindeutig bestimmt?

Sei dazu

$$\xi^\varepsilon = A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon.$$

Da u^ε schwache Lösung von (4.5) ist, erfüllt ξ^ε

$$\int_{\Omega} \xi^\varepsilon \cdot \nabla v \, dx = \langle f, v \rangle_{H^{-1}(\Omega), H_0^1(\Omega)} \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \quad (4.8)$$

Wegen $A^\varepsilon \in M(\alpha, \beta, \Omega)$ und (4.6) existiert auch hier eine Teilfolge $\xi^{\varepsilon'}$ und ein $\xi^0 \in (L^2(\Omega))^n$, so dass

$$\xi^{\varepsilon'} \rightharpoonup \xi^0 \quad \text{schwach in } (L^2(\Omega))^n.$$

Folglich können wir in (4.8) zum Grenzwert übergehen und schreiben

$$\int_{\Omega} \xi^0 \cdot \nabla v \, dx = \langle f, v \rangle_{H^{-1}(\Omega), H_0^1(\Omega)} \quad \forall v \in H_0^1(\Omega), \quad (4.9)$$

mit anderen Worten

$$-\operatorname{div} \xi^0 = f \quad \text{in } \Omega.$$

Dies bedeutet, dass wir auf die erste Frage eine positive Antwort geben können, falls wir ξ^0 durch u^0 ausdrücken können.

Im Falle, dass A^ε stark gegen ein A in $(L^\infty(\Omega))^{n \times n}$ konvergiert, können wir dies, da dann offensichtlich

$$\xi^0 = A \nabla u^0$$

ist. In diesem Fall lässt sich auch die Konvergenz der Folge u^ε leicht feststellen.

Für die meisten Anwendungen ist dieser Fall jedoch vollkommen irrelevant; in der Tat werden wir sehen, dass zum Beispiel bei Modellen für Verbundwerkstoffe eine starke Konvergenz der Koeffizientenmatrix niemals vorliegen kann. In diesen Fällen kann in der Regel nur eine schwach*-Konvergenz in $L^\infty(\Omega)$ zu einer Matrix A^* angenommen werden.

Sei nun $A \in M(\alpha, \beta, Q)$ eine Matrix, so dass a_{ij} Q -periodisch für alle $i, j = 1, \dots, n$ ist. Wir setzen

$$A^\varepsilon(x) = A\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \quad \text{f.ü. in } \mathbb{R}^n.$$

Aus Satz 4.4 folgt nun, dass für $\varepsilon \rightarrow 0$

$$A^\varepsilon \rightharpoonup \mu_Q(A) \quad \text{schwach}^* \text{ in } L^\infty(\Omega)$$

gilt, wobei

$$(\mu_Q(A))_{ij} = \mu_Q(a_{ij}).$$

Wir wissen aus den Beispielen 4.2 und 4.3, dass die Konvergenz im Allgemeinen nicht stark ist. Nun ist also $A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon$ das Produkt zweier schwach konvergenter Folgen. Die Folgerung von Satz 4.4 impliziert somit, dass im Allgemeinen

$$\xi^0 \neq \mu_Q(A) \nabla u^0.$$

4.1.4 Zwei wichtige Spezialfälle

In diesem Abschnitt wollen wir mit dem eindimensionalen Fall und dem Fall einer schichtartigen Inhomogenität zwei wichtige Spezialfälle präsentieren, die als Grundlage der Analyse von Verbundwerkstoffen dienen. Der eindimensionale Fall wurde 1967 von Spagnolo untersucht [Spa67], im Zusammenhang mit der sogenannten *G-Konvergenz* (siehe auch [Spa68]). Schichtartige Inhomogenitäten gehen auf verschiedene Arbeiten von Murat und Tartar zurück, die im Zusammenhang mit der *H-Konvergenz* stehen, die in [MT97] gut beschrieben ist. Für die Beweise der einzelnen Ergebnisse im Detail verweisen wir auch auf diese Arbeiten.

a. Der eindimensionale Fall.

Sei $\Omega = (d_1, d_2)$ ein Intervall in \mathbb{R} . Wir betrachten das Problem

$$\begin{cases} -\frac{d}{dx} \left(a^\varepsilon \frac{du^\varepsilon}{dx} \right) = f & \text{in } (d_1, d_2) \\ u^\varepsilon(d_1) = u^\varepsilon(d_2) = 0, \end{cases} \quad (4.10)$$

wobei a eine positive Funktion in $L^\infty(0, l_1)$ für ein $l_1 > 0$ sei, so dass a l_1 -periodisch ist mit

$$0 < \alpha \leq a(x) \leq \beta < +\infty$$

mit $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Die Funktion a^ε in (4.10) ist wie üblich definiert als

$$a^\varepsilon(x) = a\left(\frac{x}{\varepsilon}\right).$$

Satz 4.8 (Spagnolo, 1967) Sei $f \in L^2((d_1, d_2))$ und $u^\varepsilon \in H_0^1((d_1, d_2))$ Lösung von (4.10). Dann gilt

$$u^\varepsilon \rightharpoonup u^0 \quad \text{schwach in } H_0^1((d_1, d_2)),$$

wobei u^0 die eindeutige Lösung in $H_0^1((d_1, d_2))$ von

$$\begin{cases} -\frac{d}{dx} \left((\mu_{(0, l_1)}(1/a))^{-1} \frac{d}{dx} u \right) = f & \text{in } (d_1, d_2) \\ u^0(d_1) = u^0(d_2) = 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

ist.

In diesem Fall lässt sich u^0 also explizit berechnen. Man bemerke insbesondere, dass die Koeffizienten der Grenzgleichung nur von a abhängen.

Im Allgemeinen ist der harmonische Mittelwert $1/(\mu_{(0, l_1)}(1/a))$ von a vom arithmetischen Mittelwert $\mu_{(0, l_1)}(a)$ verschieden. Daher ist wegen

$$\frac{1}{\mu_{(0, l_1)}\left(\frac{1}{a}\right)} \frac{d}{dx} u^0 \neq \mu_{(0, l_1)}(a) \frac{d}{dx} u^0$$

auch offenbar

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(a^\varepsilon \frac{d}{dx} u^\varepsilon \right) \neq \left(\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} a^\varepsilon \right) \left(\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{dx} u^\varepsilon \right).$$

b. Schichtartige Inhomogenitäten

Das obige Resultat für den eindimensionalen Fall suggeriert, dass die Grenzgleichung im n -dimensionalen Fall mit Mittelwerten der inversen Matrix A^{-1} beschrieben werden kann. Dies ist im Allgemeinen jedoch nicht richtig, wie bereits im Falle von schichtartigen Inhomogenitäten erkannt werden kann.

Wir sprechen von einer schichtartigen Inhomogenität, wenn die Koeffizienten der Gleichung (4.5) nur von einer Raumdimension abhängen. Aus Gründen der Anschauung beschränken wir uns hierbei auf zwei Dimensionen. Sei also $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ ein Gebiet und $Q = (0, l_1) \times (0, l_2)$ mit zwei positiven Zahlen l_1 und l_2 . Weiter sei $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ mit $a_{ij}(x_1)$ $i, j = 1, 2$ nur von x_1 abhängig, wobei $a_{ij} \in M(\alpha, \beta, Q)$ l_1 -periodisch ist. Mit der üblichen Notation A^ε liest sich das Modellproblem (4.5)

$$\begin{cases} -\sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}^\varepsilon(x_1) \frac{\partial}{\partial x_j} u^\varepsilon \right) = f & \text{in } \Omega \\ u^\varepsilon = 0 & \text{auf } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.12)$$

Satz 4.9 (Murat-Tartar 1978) Sei $f \in L^2(\Omega)$ und $u^\varepsilon \in H_0^1(\Omega)$ Lösung von (4.12). Dann gilt

$$u^\varepsilon \rightharpoonup u^0 \quad \text{schwach in } H_0^1(\Omega),$$

wobei u^0 die eindeutige Lösung in $H_0^1(\Omega)$ des homogenisierten Problems

$$\begin{cases} -\sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}^* \frac{\partial}{\partial x_j} u^0 \right) = f & \text{in } \Omega \\ u^0 = 0 & \text{auf } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.13)$$

ist. Die Matrix A^* ist eine konstante positiv definite Matrix mit

$$\begin{aligned} a_{11}^* &= \mu_{(0,l_1)} \left(\frac{1}{a_{11}} \right)^{-1} \\ a_{12}^* &= a_{11}^* \mu_{(0,l_1)} \left(\frac{a_{12}}{a_{11}} \right) \\ a_{21}^* &= a_{11}^* \mu_{(0,l_1)} \left(\frac{a_{21}}{a_{11}} \right) \\ a_{22}^* &= a_{11}^* \mu_{(0,l_1)} \left(\frac{a_{12}}{a_{11}} \right) \mu_{(0,l_1)} \left(\frac{a_{21}}{a_{11}} \right) + \mu_{(0,l_1)} \left(a_{22} - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} \right). \end{aligned}$$

Das Resultat für den n -dimensionalen Fall ist sehr ähnlich. Man bemerke, dass auch hier die homogenisierte Matrix A^* nur von A abhängt, insbesondere also nicht von der rechten Seite f oder dem Gebiet Ω .

4.1.5 Das Zellenproblem

Essentiell für die Homogenisierungstheorie ist das sog. *Zellenproblem*. Es kann anschaulich als eine Gleichung, deren Lösung die qualitativen Eigenschaften der Mikroebene beinhaltet, gesehen werden. Auf der Lösung des Zellenproblems fußt die Konstruktion der homogenisierten Matrix, wie sie in Theorem 4.13 beschrieben ist. Ferner werden wir in Abschnitt 4.2 zeigen, dass die Multiskalen Basisfunktionen über die Lösung des Zellenproblems ausgedrückt werden können.

Definition 4.10 Sei $Y = (0, 1)^2$ und $\lambda \in \mathbb{R}^n$. Das Problem

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A(y)\nabla\chi_\lambda) = -\operatorname{div}(A(y)\lambda), & \text{in } Y \\ x \mapsto \chi(x) & Y\text{-periodisch} \\ \mu_Y(\chi_\lambda) = 0 \end{cases} \quad (4.14)$$

heißt Zellenproblem.

Sei $f_\lambda = -\operatorname{div}(A(y)\lambda)$ die rechte Seite von (4.14). Dann lautet die schwache Formulierung des Zellenproblems: Suche $\chi_\lambda \in W_{\text{per}}(Y)$, so dass

$$a_Y(\chi_\lambda, v) = \langle f_\lambda, v \rangle_{(W_{\text{per}}(Y))', W_{\text{per}}(Y)}, \quad (4.15)$$

wobei

$$a_Y(u, v) = \int_Y A \nabla u \nabla v \, dx$$

und wir die Notation \dot{u} aus Definition 4.6 unterdrücken und \dot{u} mit einem kanonischen Vertreter gleichsetzen.

Satz 4.11 *Sei $A \in M(\alpha, \beta, Y)$ mit Y -periodischen Koeffizienten. Dann hat (4.15) eine eindeutige Lösung und es gilt*

$$\|\chi_\lambda\|_{W_{\text{per}}(Y)} \leq \frac{1}{\alpha} \|f\|_{(W_{\text{per}}(Y))'} \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}^n.$$

BEWEIS. Wegen Lemma 4.7 ist $a_Y(\cdot, \cdot)$ koerziv auf $W_{\text{per}}(Y)$ und die Behauptung folgt aus dem Satz von Lax-Milgram [LL00]. \square

Bemerkung 4.12 *Die Lösungen des Zellenproblems sind stetig.*

BEWEIS: Nach Voraussetzung sind die Koeffizienten in $L^\infty(Y)$ und nach Satz 4.11 existiert für jedes $\lambda \in \mathbb{R}^n$ eine Lösung χ_λ in W_{per} . Für jedes $u \in \dot{u} \in W_{\text{per}}$ gilt aber nach Konstruktion auch $u \in H^1(Y)$. Nach der Theorie von De Giorgi, Nash und Moser ([GT00], Kapitel 8 oder z.T. auch [Eva10]) ist χ_λ somit auch hölderstetig, $\chi_\lambda \in C^{0,\gamma}$, $\gamma > 0$ (Definition siehe auch [Eva10]) und somit insbesondere stetig. \square

4.1.6 Konvergenz der Homogenisierung elliptischer Gleichungen

In diesem Abschnitt wollen wir das Hauptresultat der Homogenisierungstheorie formulieren. Dieses Resultat wurde auf unterschiedlichen Wegen in mehreren Arbeiten erreicht, wobei jede Art des Beweises eine neue Sichtweise auf das Resultat erlaubt.

Insbesondere wollen wir einen passenden Konvergenzbegriff einführen, der es uns erlaubt, das Konvergieren einer Gleichung gegen eine Grenzgleichung zu formulieren. Auch dazu gibt es verschiedene Ansätze. Den ersten Ansatz lieferte 1967 die im Abschnitt über den eindimensionalen Fall angesprochene Arbeit von Spagnolo, welcher als *G-Konvergenz* bezeichnet wird [Spa67]. Die im Falle von schichtartigen Inhomogenitäten erwähnte Arbeit von Murat und Tartar von 1997 führt die sogenannte *H-Konvergenz* ein und geht schon auf frühere Arbeiten der Autoren zurück, etwa [?].

Die sogenannte *Methode der oszillierenden Testfunktionen* geht ebenfalls auf Tartar zurück [Tar78].

Schließlich ist die *Zweiskalenkonvergenz* von Allaire zu erwähnen, die den heute größten Einfluss hat [All92]. Wir wollen uns im Folgenden nicht zuletzt deshalb ausschließlich auf die Zweiskalenkonvergenz als Methode des Beweises und der Analyse beziehen.

Es kann gezeigt werden, dass die hier genannten Konvergenzbegriffe unter bestimmten Voraussetzungen äquivalent sind [CD99].

Theorem 4.13 Sei $f \in H^{-1}(\Omega)$ und u^ε Lösung von (4.5). Dann gilt

$$u^\varepsilon \rightharpoonup u^0 \text{ schwach in } H_0^1(\Omega)$$

und

$$A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon \rightharpoonup A^0 \nabla u^0 \text{ schwach in } (L^2(\Omega))^n,$$

wobei u^0 die eindeutige Lösung des homogenisierten Problems

$$\begin{cases} -\operatorname{div} A^0 \nabla u^0 = f & \text{in } \Omega, \\ u^0 = 0 & \text{auf } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.16)$$

und die Matrix A^0 konstant, elliptisch und durch

$$A^0 \lambda = \mu_Y(A \nabla \chi_\lambda) \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}^n \quad (4.17)$$

mit der Lösung χ_λ des Zellenproblems (4.14) gegeben ist.

Die Gleichung (4.5) konvergiert also für $\varepsilon \rightarrow 0$ gegen eine Gleichung gleichen Typs, wobei die homogenisierte Koeffizientenmatrix in (4.16) durch bestimmte Mittelwerte gegeben ist, die ihrerseits mit Lösungen des Zellenproblems zusammenhängen. Besonders wichtig ist hierbei auch, dass diese Matrix A^0 nicht von der rechten Seite f , den Randwerten oder dem Gebiet Ω abhängt. Dies garantiert, dass wir eine einmal berechnete Matrix A^0 auch für verschiedene rechte Seiten, Gebiete und Randwerte benutzen können, anstatt sie in jedem Fall neu berechnen zu müssen.

Um Theorem 4.13 zu beweisen, führen wir zunächst den Begriff der Zweiskalenkonvergenz ein.

Definition 4.14 (Zweiskalenkonvergenz) Sei (v^ε) eine Folge von Funktionen in $L^2(\Omega)$. Wir sagen, v^ε konvergiert zweiskalig gegen $v_0(x, y)$ mit $v_0 \in L^2(\Omega \times Y)$, falls für jede Funktion $\psi = \psi(x, y) \in \mathcal{D}(\Omega) \times C_{\text{per}}^\infty(Y)$ gilt

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} v^\varepsilon(x) \psi(x, x/\varepsilon) dx = \frac{1}{|Y|} \int_{\Omega} \int_Y v_0(x, y) \psi(x, y) dy dx.$$

Bemerkungen: 1. Die Zweiskalenkonvergenz impliziert schwache Konvergenz.
2. Falls (v^ε) eine Entwicklung der Form

$$v^\varepsilon(x) = v_0(x, x/\varepsilon) + \varepsilon v_1(x, x/\varepsilon) + \varepsilon^2 v_2(x, x/\varepsilon) + \dots \quad (4.18)$$

mit glatten und im zweiten Argument Y -periodischen Funktionen v_1, v_2, \dots besitzt, so konvergiert v^ε zweiskalig gegen den ersten Term v_0 .

Unser Ziel ist es nun, zu zeigen, dass die Lösung u^ε des Problems (4.5) zweiskalig gegen die homogenisierte Lösung u^0 aus (4.16) konvergiert. Dies beweist Theorem 4.13. Um einen einfacheren Zugang zu erhalten, treffen wir hier noch eine Zusatzvoraussetzung: die Lösung u^ε von (4.5) habe eine Entwicklung der

Form (4.18), d.h. es existieren glatte und im zweiten Argument Y -periodische Funktionen u_1, u_2, \dots mit

$$u^\varepsilon(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i u_i(x, x/\varepsilon). \quad (4.19)$$

Wir setzen nun (4.19) in (4.5) ein und erhalten

$$\begin{aligned} & -\varepsilon^{-2} [\operatorname{div}_y A \nabla_y u_0] \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) \\ & -\varepsilon^{-1} [\operatorname{div}_y A (\nabla_x u_0 + \nabla_y u_1) + \operatorname{div}_x A \nabla_y u_0] \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) \\ & -\varepsilon^0 [\operatorname{div}_x A (\nabla_x u_0 + \nabla_y u_1) + \operatorname{div}_y A (\nabla_x u_1 + \nabla_y u_2)] \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) \\ & - \sum_{i=1}^{+\infty} \varepsilon^i [\operatorname{div}_x A (\nabla_x u_i + \nabla_y u_{i+1}) + \operatorname{div}_y A (\nabla_x u_{i+1} + \nabla_y u_{i+2})] \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) \\ & = f(x) \end{aligned}$$

Aus dieser Gleichungskette ziehen wir die folgenden vier Teilgleichungen (4.20)-(4.23).

ε^i -Gleichung.

$$-\operatorname{div}_y (A(y) \nabla_y u_{i+2}(x, y)) = F(u_i, u_{i+1})(x, y) \quad \text{in } Y \quad (4.20)$$

Dies ist eine partielle Differentialgleichung in y , welche wir mit periodischen Randbedingungen versehen. Die (makroskopische) Variable x ist hierbei nur ein Parameter.

ε^{-2} -Gleichung.

$$-\operatorname{div}_y (A(y) \nabla_y u_0(x, y)) = 0 \quad \text{in } Y \quad (4.21)$$

Die (eindeutige) Lösung hiervon hängt nicht von y ab, daher notieren wir fortan

$$u_0(x, y) \equiv u_0(x).$$

ε^{-1} -Gleichung.

$$-\operatorname{div}_y A(y) \nabla_y u_1(x, y) = \operatorname{div}_y A(y) \nabla_x u_0(x) \quad \text{in } Y, \quad (4.22)$$

was eine Gleichung für u_1 ist.

ε^0 -Gleichung.

$$\begin{aligned} & -\operatorname{div}_y A(y) \nabla_y u_2(x, y) \\ & = \operatorname{div}_y A(y) \nabla_x u_1 + \operatorname{div}_x A(y) (\nabla_y u_1 + \nabla_x u_0) + f(x), \end{aligned} \quad (4.23)$$

was eine Gleichung zur Bestimmung von u_2 ist.

Für eine Lösung u_1 von (4.22) gilt nun

$$u_1(x, y) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial u_0}{\partial x_i}(x) \chi_i(y), \quad (4.24)$$

wobei χ_i die Lösung des Zellenproblems (4.14) in i -ter Einheitsrichtung, also mit $\lambda = e_i$ ist.

Analog zu der Bemerkung zum Zellenproblem ist nach der Fredholmschen Alternative (4.23) genau dann eindeutig lösbar, falls

$$\int_Y (\operatorname{div}_y A(y) \nabla_x u_1 + \operatorname{div}_x A(y) (\nabla_y u_1 + \nabla_x u_0) + f(x)) dy = 0$$

gilt. Somit ist wegen (4.24) u_0 die Lösung des homogenisierten Problems (4.16) und unter der Voraussetzung (4.19) ist Theorem 4.13 wegen der Bemerkung zu (4.18) bewiesen. \square

Satz 4.15 *Sei $A \in M(\alpha, \beta, Y)$. Dann ist die homogenisierte Matrix A^0 aus Theorem 4.13 elliptisch.*

Der Beweis ist in [CD99] zu finden.

4.1.7 Korrekturterm erster Ordnung

Die Annahme, u^ε besitze eine Reihenentwicklung gemäß (4.19), stimmt im Allgemeinen nicht. Der Beweis des Theorems ohne diese Voraussetzung mit der Zweiskalenkonvergenz ist dennoch möglich (siehe [All92],[CD99]). Dazu wird folgendes Lemma benötigt [CD99].

Lemma 4.16 *Es existiert $u_1 = u_1(x, y) \in L^2(\Omega; H^1(Y)/\mathbb{R})$ so dass zumindest eine Teilfolge von u^ε existiert, so dass gilt*

$$\nabla u^\varepsilon \rightarrow \nabla_x u_0 + \nabla_y u_1(\cdot, \cdot/\varepsilon) \quad \text{zweiskalig.}$$

Hierbei ist u_1 durch (4.22) bzw. (4.24) gegeben.

Wir können also u_1 aus (4.24) als Korrekturterm erster Ordnung für die Homogenisierung auffassen. Aus Lemma 4.16 lässt sich bereits herauslesen, dass dies in erster Linie für die Ableitungen von u^ε wichtig ist. Tatsächlich gilt sogar das folgende Theorem [BLP78], [All99].

Theorem 4.17 *Es gibt ein $C > 0$, so dass gilt*

$$\|u^\varepsilon - u^0 - \varepsilon u_1(\cdot, \cdot/\varepsilon)\|_{H^1(\Omega)} \leq C\sqrt{\varepsilon}. \quad (4.25)$$

Die Abschätzung in Theorem 4.17 ist im Allgemeinen optimal, überrascht dennoch ein wenig, da man nicht zuletzt wegen des Charakters einer Reihenentwicklung von u^ε auch als Ordnung ε anstatt von $\sqrt{\varepsilon}$ erwarten könnte. Die Ursache dieser schlechten Abschätzung ist in neuerer Zeit analysiert und gut verstanden worden (siehe [BLP79], [BP89] und vor allem [All99]) und wird im folgenden Abschnitt beschrieben werden.

4.1.8 Der Einfluss von Randschichten

Wie bereits bemerkt, ist die Annahme (4.19) im Allgemeinen nicht zutreffend. Bereits das Addieren des Korrekturterms erster Ordnung gemäß (4.24) zur Approximation

$$u^\varepsilon(x) \approx u_0(x) + \varepsilon u_1(x, x/\varepsilon)$$

wirft Probleme auf, da die rechte Seite mit u_1 nicht die Randwerte von u^ε erfüllt. Allein diese Eigenschaft macht die Homogenisierung mit Korrektur für viele Probleme sehr unbefriedigend; insbesondere bei Problemen mit (periodisch) oszillierenden Rändern, wie sie im Kontext von Flüssen über raue Oberflächen oder dünnen Beschichtungen auftreten.

Der Ursprung der schlechten Ordnung in (4.25) ist also auf den Einfluss von sogenannten *Randschichten* zurückzuführen. Statt des Ansatzes (4.19) setzen wir nun voraus, dass u^ε die Entwicklung

$$u^\varepsilon(x) = u_0(x) + \varepsilon \left[u_1(x, x/\varepsilon) + u_1^{bl,\varepsilon}(x) \right] + \varepsilon^2 \left[u_2(x, x/\varepsilon) + u_2^{bl,\varepsilon}(x) \right] + \dots \quad (4.26)$$

besitzt, wobei die Funktionen $u_i^{bl,\varepsilon}$ (*bl für boundary layer*) die Gleichungen

$$\begin{cases} -\operatorname{div} A^\varepsilon \nabla u_i^{bl,\varepsilon} = 0, & \text{in } \Omega \\ u_i^{bl,\varepsilon}(x) = -u_i(x, x/\varepsilon) & \text{auf } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.27)$$

erfüllen. Jeder Term $(u_i + u_i^{bl,\varepsilon})$ erfüllt nun eine homogene Dirichlet-Randbedingung. Hierbei hängt jedoch $u_i^{bl,\varepsilon}$ stark von ε ab, ist aber keine im zweiten Argument periodische Funktion. In unserem Fall interessieren wir uns nur für den ersten Term $u_1^{bl,\varepsilon}$, der mit dem Zellenproblem als Lösung von

$$\begin{cases} -\operatorname{div} A^\varepsilon \nabla u_1^{bl,\varepsilon} = 0 & \text{in } \Omega, \\ u_1^{bl,\varepsilon}(x) = \sum_{j=1}^n \chi_j \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial u}{\partial x_j}(x) & \text{auf } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.28)$$

gegeben ist. Mit diesem zusätzlichen Randschichtterm ist die gewünschte Ordnung dann gegeben.

Theorem 4.18 *Mit den oben definierten Korrekturen u_1 und Randschichttermen $u_1^{bl,\varepsilon}$ gilt nun*

$$\|u^\varepsilon - u(x) - \varepsilon u_1(\cdot, \cdot/\varepsilon) - \varepsilon u_1^{bl,\varepsilon}\|_{H^1(\Omega)} \leq C\varepsilon. \quad (4.29)$$

BEWEIS: [All99].

Natürlich ist dieses Resultat auf seine Art unbefriedigend. Die Korrektur mittels des Randschichtterms hängt selbst wieder in hohem Maße von ε ab, so dass man den Korrekturterm auf geeignete Weise homogenisieren müsste. Jedoch wird hierdurch die Ursache einer suboptimalen Konvergenzordnung sichtbar. Dies motiviert den folgenden Satz.

Satz 4.19 (Avellaneda-Lin) *Wir nehmen an, u_0 sei in $W^{3,\infty}(\Omega)$. Dann gilt für jede offene Menge $\omega \subset \Omega$, für die eine kompakte Menge $K \subset \Omega$ existiert, so dass $\omega \subset K \subset \Omega$:*

$$\|u^\varepsilon - u_0 - \varepsilon u_1(\cdot, \cdot/\varepsilon)\|_{H^1(\omega)} \leq C\varepsilon$$

mit einer Konstanten $C > 0$, die nur von ω abhängt.

Wegen seiner Bedeutung wollen wir den Beweis hier wiedergeben. Dafür benötigen wir zunächst folgendes Lemma.

Lemma 4.20 *Für eine Folge ϕ_ε in $H^1(\Omega)$ definieren wir die Folge $z_\varepsilon \in H^1(\Omega)$ als Lösungen von*

$$\begin{cases} -\operatorname{div} A^\varepsilon \nabla z_\varepsilon = 0 & \text{in } \Omega \\ z_\varepsilon = \phi_\varepsilon & \text{auf } \partial\Omega. \end{cases} \quad (4.30)$$

Es existiere eine Konstante c , so dass $\|\phi_\varepsilon\|_{L^\infty(\partial\Omega)} \leq c$. Dann existiert für jede offene Menge $\omega \subset \subset \Omega$ ein $C > 0$, so dass

$$\|z_\varepsilon\|_{H^1(\omega)} \leq C$$

gilt.

BEWEIS. Sei $\omega \subset \subset \Omega$. Sei ϕ eine glatte Funktion mit kompaktem Träger in Ω , so dass $\phi = 1$ in ω . Wir multiplizieren die Gleichung (4.30) mit der Testfunktion $\phi^2 z_\varepsilon$ und erhalten

$$\int_{\Omega} \phi^2 A^\varepsilon \nabla z_\varepsilon \nabla z_\varepsilon dx = -2 \int_{\Omega} \phi z_\varepsilon A^\varepsilon \nabla z_\varepsilon \nabla \phi dx.$$

Dies impliziert

$$\|\nabla z_\varepsilon\|_{L^2(\omega)} \leq \|\phi \nabla z_\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|z_\varepsilon \nabla \phi\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|z_\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}.$$

Da es sich bei (4.30) um eine skalare Gleichung handelt und $A^\varepsilon \in M(\alpha, \beta, \Omega)$, gilt das Maximumprinzip und $\|z_\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|\phi_\varepsilon\|_{L^\infty(\partial\Omega)}$ und somit

$$\|z_\varepsilon\|_{H^1(\omega)} \leq C \|z_\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq C.$$

□

BEWEIS VON SATZ 4.19. Es gilt

$$\|u^\varepsilon - u - \varepsilon u_1\|_{H^1(\omega)} \leq \|u^\varepsilon - u - \varepsilon u_1 - \varepsilon u_1^{bl,\varepsilon}\|_{H^1(\Omega)} + \varepsilon \|u_1^{bl,\varepsilon}\|_{H^1(\omega)}.$$

Da $u_1(\cdot, \cdot/\varepsilon)$ eine beschränkte Folge in $L^2(\partial\Omega)$ ist, folgt die Behauptung aus Theorem 4.18 und dem obigen Lemma. \square

Bemerkung. Im Falle nicht skalarer Gleichungen kann ein analoges Resultat erzielt werden, indem besondere Voraussetzungen an die Glattheit von $\partial\Omega$ gestellt werden [All99].

4.2 Konvergenz der Multiskalen Finite Elemente Methode

Wir wollen in diesem Abschnitt Theorem 3.4 mit den Mitteln aus der Homogenisierungstheorie beweisen.

Wir beschränken uns im Folgenden auf den periodischen Fall, wollen aber sowohl für die feine als auch für die grobe Skala Ansatzräume stückweiser polynomialer Funktionen beliebigen Grades zulassen.

Die Grundidee ist, zu bemerken, dass die Multiskalen Basisfunktionen ϕ_i in diesem Fall durch eine Variablentransformation $\tilde{w}^\varepsilon : x \mapsto x + \varepsilon\chi(x/\varepsilon)$ mit der Standardbasis ϕ_i^0 durch

$$\phi_i(x) = (\phi_i^0 \circ \tilde{w}^\varepsilon)(x) = \phi_i^0\left(x + \varepsilon\chi\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)\right) \quad (4.31)$$

verknüpft sind, wobei $\chi = (\chi_1, \dots, \chi_n)^T$ die Lösung des Zellenproblems ist.

Dazu definieren wir allgemein den Ansatzraum $V_h \subseteq H_0^1(\Omega)$ von stückweise P^k -Funktionen,

$$V_h = \text{span}\{\phi_1^0, \dots, \phi_N^0\}.$$

Wir definieren die *Multiskalen FEM Basis* nun neu durch

$$\phi_j^\varepsilon(x) = \phi_j^0 \circ w^\varepsilon, \quad l = 1, \dots, N,$$

wobei die Funktionen $w^\varepsilon = (w_1^\varepsilon, \dots, w_N^\varepsilon)^T$ Lösungen von

$$\begin{cases} -\text{div}(A^\varepsilon \nabla w_i^\varepsilon) = 0 & \text{in } \tau \\ w_i^\varepsilon = x_i & \text{auf } \partial\tau \end{cases} \quad (4.32)$$

für jedes $\tau \in \mathcal{T}$ sind. Wir wollen (4.32) auch durch eine Finite Elemente Approximation lösen, indem wir jedes Dreieck $\tau \in \mathcal{T}_h$ mit der feinen Skala h^0 triangulieren. So erhalten wir die Näherungen $w_{h^0}^\varepsilon$ für w^ε , die stückweise Polynome P^{k_0} seien.

Wir erhalten so eine konforme Finite Elemente Methode zur Lösung von (4.5),

$$V_h^\varepsilon = \text{span}\{\phi_1^\varepsilon, \dots, \phi_N^\varepsilon\}.$$

Man kann V_h^ε als " $V_h \circ w_{h^0}^\varepsilon$ " verstehen.

Satz 4.21 Für $k = k^0 = 1$ ergibt sich für ϕ_j^ε durch (4.31) die in Algorithmus 3.2 beschriebene MsFEM Basis.

BEWEIS. Auf Elementebene gilt

$$\phi_i^\varepsilon(x) = p_i \circ w_{h^0}^\varepsilon(x) \quad \forall x \in \tau$$

mit einem Polynom $p_i \in P^1$ für jedes $\tau \in \mathcal{T}$. Wegen der Linearität von p_i ist

$$\phi_i^\varepsilon(x) = p_i(x) + \sum_{j=1}^n \left(w_{h^0,j}^\varepsilon(x) - x_j \right) \frac{\partial p_i}{\partial x_j}(x) \quad \forall x \in \tau$$

und daher

$$\operatorname{div} \left(A^\varepsilon \nabla \phi_j^\varepsilon \right) = \sum_{j=1}^n \operatorname{div} \left(A^\varepsilon \nabla w_{h^0,j}^\varepsilon \right) \frac{\partial p_i}{\partial x_j} \quad \forall x \in \tau.$$

Wegen (4.32) ist also

$$\begin{cases} -\operatorname{div} \left(A^\varepsilon \nabla \phi_j^\varepsilon \right) = 0 & \text{in } \tau \\ \phi_j^\varepsilon = p_i & \text{auf } \partial\tau. \end{cases}$$

□

Theorem 4.22 (Allaire, Brizzi 2005) Sei u^ε Lösung von (4.5) und $u_h^\varepsilon = u_h \circ w_{h^0}^\varepsilon$ die MsFEM Lösung nach obigem Schema. Die feine Skala sei von der Größe h^0 und die Multiskalen Basisfunktionen mit Finiten Elementen vom Grad k^0 approximiert. Sei weiterhin $u_0 \in W^{k+1,\infty}$ die Lösung der homogenisierten Gleichung (4.16) und $\chi_i \in W^{1,\infty}(Y)$ Lösung des Zellenproblems (4.14). Dann existiert eine von ε und h unabhängige Konstante C , so dass

$$\|u^\varepsilon - u_h^\varepsilon\|_{H^1(\Omega)} \leq C \left(h^k + \left(\frac{\varepsilon}{h} \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{h^0}{\varepsilon} \right)^{k^0} \right). \quad (4.33)$$

BEWEIS. Da es sich um konforme Finite Elemente handelt, gilt das CÉA-LEMMA,

$$\|u^\varepsilon - u_h^\varepsilon\|_{H^1(\Omega)} \leq C \inf_{v_h^\varepsilon \in V_h^\varepsilon} \|u^\varepsilon - v_h^\varepsilon\|_{H^1(\Omega)}.$$

Es sei Π_h die Projektion auf V_h und Π_h^ε die Projektion auf V_h^ε . Es gilt $\Pi_h^\varepsilon v = (\Pi_h v) \circ w^\varepsilon$. Aus dem CÉA-LEMMA folgt nun

$$\|u^\varepsilon - u_h^\varepsilon\|_{H^1(\Omega)} \leq C \|u^\varepsilon - \Pi_h^\varepsilon u_0\|_{H^1(\Omega)}. \quad (4.34)$$

Mit der Variablentransformation $\tilde{w}^\varepsilon(x) = x + \varepsilon \chi(x/\varepsilon)$ schätzen wir nun die rechte Seite von (4.34) ab:

$$\begin{aligned} \|\nabla u^\varepsilon - \nabla (\Pi_h^\varepsilon u_0)\|_{L^2(\Omega)} &\leq C \left(\|\nabla u^\varepsilon - \nabla (u_0 \circ \tilde{w}^\varepsilon)\|_{L^2(\Omega)} \right. \\ &\quad + \|\nabla \{(u_0 - \Pi_h u_0) \circ \tilde{w}^\varepsilon\}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \|\nabla \{\Pi_h u_0 \circ (\tilde{w}^\varepsilon - w^\varepsilon)\}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad \left. + \|\nabla \{\Pi_h u_0 \circ (w^\varepsilon - w_{h^0}^\varepsilon)\}\|_{L^2(\Omega)} \right). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Wir wollen diese vier Terme einzeln diskutieren. Der erste Term ist der Homogenisierungsfehler und wird durch (4.25) beschrieben. Der zweite Term ist der Interpolationsfehler auf dem groben Gitter, während der vierte den Interpolationsfehler auf dem feinen Gitter repräsentiert. Der dritte Term kann als Homogenisierungsfehler für die lokalen oszillierenden Testfunktionen gesehen werden.

Für den zweiten Summanden von (4.35) erhalten wir mit der Kettenregel

$$\begin{aligned} & \|(\nabla \tilde{w}^\varepsilon)\{\nabla(u_0 - \Pi_h u_0)\} \circ \tilde{w}^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \\ & \leq \|Id + \nabla_y \chi\|_{L^\infty(Y)} \|\{\nabla(u_0 - \Pi_h u_0)\} \circ \tilde{w}^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Wir entwickeln die rechte Seite nach Taylor,

$$\begin{aligned} \{\nabla(u_0 - \Pi_h u_0)\} \circ \tilde{w}^\varepsilon &= \nabla(u_0 - \Pi_h u_0)(x) \\ &+ \varepsilon \int_0^1 \nabla \nabla(u_0 - \Pi_h u_0) \left(x + \varepsilon t \chi \left(\frac{x}{\varepsilon}\right)\right) \cdot \chi \left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dt \end{aligned}$$

und erhalten so als Abschätzung der rechten Seite

$$\begin{aligned} & \|Id + \nabla_y \chi\|_{L^\infty(Y)} (\|u_0 - \Pi_h u_0\|_{H^1(\Omega)} + \varepsilon \|u_0 - \Pi_h u_0\|_{W^{2,\infty}(\Omega)} \|\chi\|_{L^2(Y)}) \\ & \leq \|Id + \nabla_y \chi\|_{L^\infty(Y)} \|u_0\|_{W^{k+1,\infty}(\Omega)} \left(h^k + \varepsilon h^{k-1} \|\chi\|_{L^2(Y)}\right) \end{aligned}$$

nach Interpolationsabschätzungen für Lagrangesche Finite Elemente P^k [Bra07].

Der dritte Term in (4.35) ist

$$\begin{aligned} & \|\nabla(\tilde{w}^\varepsilon - w_{h_0}^\varepsilon)\{\nabla(\Pi_h u_0)\} \circ (\tilde{w}^\varepsilon - w_{h_0}^\varepsilon)\|_{L^2(\Omega)} \\ & \leq \|u_0\|_{W^{1,\infty}(\Omega)} \|\nabla(\tilde{w}^\varepsilon - w_{h_0}^\varepsilon)\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Wir fassen die rechte Seite elementweise auf:

$$\|\nabla(\tilde{w}^\varepsilon - w^\varepsilon)\|_{L^2(\Omega)}^2 = \sum_{\tau \in \mathcal{T}} \|\nabla(\tilde{w}^\varepsilon - w^\varepsilon)\|_{L^2(\tau)}^n.$$

Da w^ε gegen $f(x) \equiv x$ schwach in $H^1(\tau)$ für $\varepsilon \rightarrow 0$ konvergiert, ist \tilde{w}^ε genau die Summe aus homogenisiertem Grenzwert und Korrekturterm. Aus Theorem 4.17 kann leicht, wie in [BLP78] beschrieben, die folgende Abschätzung für u^ε und die zugehörige Lösung des homogenisierten Problems u_0 gewonnen werden:

$$\|u^\varepsilon - u_0 - \varepsilon \sum_{i=1}^n \chi_i \left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \frac{\partial v_0}{\partial x_i}(x)\|_{H^1(\Omega)} \leq C \sqrt{\varepsilon} \sqrt{|\partial\Omega|} \|u_0\|_{W^{2,\infty}(\Omega)}. \quad (4.36)$$

Hier ist τ von der Größe h^n und somit $\partial\tau$ von der Größe h^{n-1} und die Gesamtzahl an Zellen von der Größenordnung h^{-n} . Wir erhalten

$$\|\nabla(\tilde{w}^\varepsilon - w^\varepsilon)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C \frac{\varepsilon}{h}$$

als obere Schranke für den dritten Term.

Für den vierten Term erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned} & \|[\nabla(w^\varepsilon - w_{h^0}^\varepsilon)] \{\nabla(\Phi_h u_0)\} \circ (w^\varepsilon - w_{h^0}^\varepsilon)\|_{L^2(\Omega)} \\ & \leq \|u_0\|_{W^{1,\infty}} \|\nabla(w^\varepsilon - w_{h^0}^\varepsilon)\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Für den Approximationsfehler zwischen w^ε und FEM-Näherung $w_{h^0}^\varepsilon$ können wir übliche Interpolationsresultate aus der Theorie der Finiten Elemente nutzen,

$$\|\nabla(w^\varepsilon - w_{h^0}^\varepsilon)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C(h^0)^{2k^0} \sum_{\tau \in \mathcal{T}} |w^\varepsilon|_{H^{k^0+1}(\tau)}^2,$$

falls A stückweise glatt ist. In diesem Fall gilt auch

$$|w^\varepsilon|_{H^{k^0+1}(\tau)} \leq C\varepsilon^{-k^0} \sqrt{|\tau|}.$$

Wir kombinieren alle vier Abschätzungen und erhalten

$$\|\nabla u^\varepsilon - \nabla(\Pi^\varepsilon u^0)\|_{L^2(\Omega)} \leq C \left(\sqrt{\varepsilon} + (h^k + \varepsilon h^{k-1}) + \sqrt{\frac{\varepsilon}{h}} + \left(\frac{h^0}{\varepsilon}\right)^{k^0} \right),$$

woraus die Behauptung folgt. \square

Bemerkung. Die Ordnung in (4.33) ist wieder schlechter als erwartet. In Analogie zu den Resultaten aus der klassischen Homogenisierungstheorie wird auch hier die volle Ordnung durch den Einfluss bestimmter Randschichten gestört. Die sogenannte *Oversampling*-Methode, die die Gleichung auf einer größeren Menge löst, um auf der nun im Inneren liegenden Originalmenge die volle Ordnung zu erhalten, wird aktuell untersucht, siehe [EHW00].

4.3 Numerische Homogenisierung

Wir wollen im Folgenden die direkte Umsetzung der Homogenisierung mit numerischen Methoden beschreiben. Das resultierende Gesamtverfahren bezeichnen wir als numerische Homogenisierung.

Wir lösen zunächst das Zellenproblem (4.14) mit Finiten Elementen; hier besteht die Hauptschwierigkeit in den periodischen Randbedingungen. Die Lösungen des Zellenproblems verwenden wir daraufhin zur Berechnung einer Näherung der homogenisierten Matrix A^0 . Hierbei müssen wir auf eine passende Integrationsstrategie zurück greifen. Schließlich liefert uns diese Matrix das homogenisierte Problem (4.16), welches wir ebenfalls mit Finiten Elementen lösen wollen.

Wir erhalten schließlich eine Näherungslösung u_h^0 der Gleichung (4.16), für deren Approximationsgüte an die Lösung der Modellgleichung u^ε wir uns interessieren. Der Gesamtfehler des Verfahrens setzt sich hier aus einem Homogenisierungsfehler und einem Diskretisierungsfehler zusammen. Der Homogenisierungsfehler entsteht durch den Prozess des Homogenisierens der Modellgleichung (4.5) und wurde für den kontinuierlichen Fall in Abschnitt 4.1 untersucht, während wir für den Diskretisierungsfehler auf Methoden aus den Finiten Elementen zurückgreifen werden.

Da die Lösung u_h^0 unabhängig vom Parameter ε ist, ist es unter Umständen wünschenswert, die Korrektur εu^1 hinzuzunehmen. Diese sollte, wie in Abschnitt 4.1.7 diskutiert, eine Verbesserung insbesondere des Fehlers in der H^1 -Norm bedeuten. Wir wollen den Einsatz der Korrektur als Verbesserung der Lösungseigenschaften der Approximation in verschiedenen Normen quantifizieren und am numerischen Modellbeispiel diskutieren.

Die Ergebnisse aus Abschnitt 2.5 wollen wir schließlich benutzen, um ein adaptives Verfahren zu konstruieren, welches den Fehler unserer Lösung verbessern soll, ohne die Anzahl der Freiheitsgrade unnötig zu erhöhen. Die Schwierigkeit hierbei besteht darin, dass die Näherungen u_h^0 und $u_h^0 + \varepsilon u_h^1$ Finite Elemente Approximationen an eine andere Gleichung sind, die nicht die Gleichung ist, die ursprünglich approximiert werden soll. Mit dem oszillierenden Residuum werden wir einen Fehlerschätzer angeben, dessen Güte in Bezug auf die Originalgleichung quantifiziert werden kann.

4.3.1 Lösen des Zellenproblems

Der erste Schritt der numerischen Homogenisierung ist das Lösen des Zellenproblems,

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y \{A(y)(e_i + \nabla_y \chi_i)\} = 0 & \text{in } (0, 1)^2 \\ y \mapsto \chi_i(y) & (0, 1)^2\text{-periodisch} \end{cases} \quad (4.37)$$

mit

$$\int_{(0,1)^2} \chi_i \, dx = 0. \quad (4.38)$$

Formal gesehen stellt das Zellenproblem eine Familie von Problemen bezüglich $\lambda \in \mathbb{R}^n$ dar. Da es sich dabei um ein lineares Problem handelt, wird die Lösungsmenge vollständig durch die *Basislösungen* für $\lambda = e_1, \dots, e_n$ charakterisiert. Daher definieren wir fortan die Lösung des Zellenproblems als das n -Tupel von Basislösungen,

$$\chi = (\chi_1, \dots, \chi_n)^T.$$

Wir beschränken uns in Zukunft auf den zweidimensionalen Fall, $n = 2$.

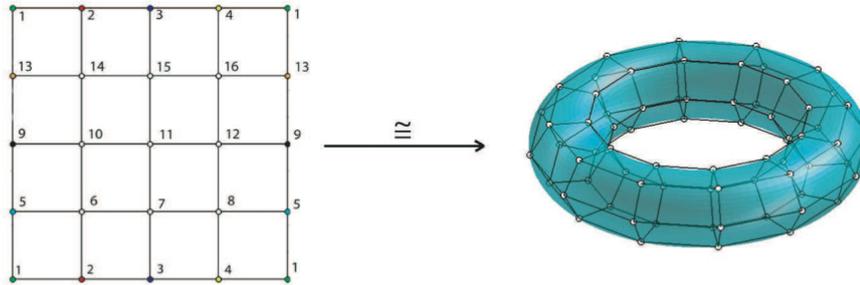


Abbildung 4.2: *Toroidales Vergittern: die Gitternummern an den Kanten (o/u bzw. r/l) stimmen überein.*

a. Periodische Finite Elemente.

Die Schwierigkeit bei der Lösung besteht hierbei in den periodischen Randbedingungen. Hierbei soll eine Lösung nur auf der Referenzmenge, die meist ein Quadrat oder Rechteck ist, berechnet werden; dabei soll die Lösung an der rechten und linken sowie an der oberen und unteren Kante gleich sein.

Zur Lösung von solchen Problemen mit periodischen Randbedingungen eignen sich mehrere Methoden. Wir wollen aber hier stets nur Probleme der Form (4.37) lösen, daher wählen wir einen spezielleren Weg, der topologisch betrachtet der Lösung der Gleichung auf einem Torus entspricht. Wie in Abbildung 4.2 zu sehen ist, identifizieren wir die gegenüberliegenden Kanten des Einheitsquadrats bereits bei der Vernetzung miteinander, indem wir in den Punktelisten die entsprechenden Nummern gleichsetzen. Dies ist nur für Netze möglich, an denen die x_1 -Koordinaten (rechte/linke Kante) bzw. die x_2 -Koordinaten (obere/untere Kante) übereinstimmen.

b. Mittelwert-Nebenbedingung.

Im obigen Abschnitt lässt sich bereits erkennen, dass eine periodische Lösung von (4.37) nur bis auf eine additive Konstante eindeutig bestimmt ist. Die zweite Schwierigkeit bei der Berechnung der Lösung des Zellenproblems ist also die geforderte Nebenbedingung (4.38), die bei der Lösung des resultierenden Gleichungssystems einfließen muss. Zur Lösung von Problemen unter Nebenbedingungen haben wir drei Methoden in Betracht gezogen: der *Uzawa-Algorithmus*, das *Penalty-Verfahren* und die Erweiterung des Gleichungssystems.

Beim Uzawa-Algorithmus [Bra07] wird eine zum Gradientenverfahren analoge Vorgehensweise propagiert, bei der die Abstiegsrichtungen auf einer durch die Nebenbedingung gegebenen Mannigfaltigkeit liegen. Vielfach benutzt werden sogenannte *Penalty-Verfahren*, bei denen bei der Benutzung eines iterativen Lösungsverfahrens für das Gleichungssystem in jedem Iterationsschritt die Abweichung der aktuellen Näherung zum gewünschten Wert, also hier $\int_Y \chi_i(x) dx = 0$ berechnet wird. Diese Abweichung ist nun der *Strafterm (Penalty)*, der der ak-

tuellen Näherung auferlegt, d.h. abgezogen wird. Ein solches Penalty-Verfahren ist also eine Korrekturmethode. Verfahren dieser Art sind leicht zu implementieren und funktionieren sehr gut, setzen jedoch die Verwendung eines iterativen Lösungsverfahrens für das Gleichungssystem (und entsprechenden Zugang) voraus.

Nach anfänglichen Tests mit dem eher langsamen Uzawa-Algorithmus und einem CG-Verfahren mit Strafterm kam jedoch keine der beiden Methoden wirklich in Frage, da wir mit dem in Matlab vorgegebenen Löser erheblich bessere Rechenzeiten erreichen konnten. Stattdessen modifizieren wir das Gleichungssystem $Ax = b$ (A in diesem Falle nicht zu verwechseln mit der Koeffizientenmatrix des Problems), indem wir die Nebenbedingung hinzufügen:

$$\begin{pmatrix} & & c_1 \\ & A & \vdots \\ & & c_N \\ c_1 & \dots & c_N & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \\ x_{N+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

Dies erzeugt (wir fordern $x_{N+1} = 0$) eine Lösung, die die Nebenbedingung $\sum_{j=1}^N c_j x_j = 0$ erfüllt. Wir können unter Benutzung der Trapezregel die Werte c_j als Summation der Flächeninhalte der am Punkt x_j liegenden Vierecke bestimmen und erzeugen für lineare Finite Elemente eine Lösung, für die die geforderte Nebenbedingung (4.38) gilt. Aus Regularitätsgründen ersetzen wir die Null in der letzten unteren Position durch einen Wert $\varepsilon > 0$, den es sorgfältig zu wählen gilt: je größer dieser Wert, desto mehr wird die Lösung x gestört, je kleiner, desto schlechter ist die Konditionszahl der Matrix und somit ungenauer die Lösung. Es gibt zahlreiche Untersuchungen für optimale Größenordnungen solcher Parameter. In unserem Fall haben wir $\varepsilon = 10^{-6}$ bestimmt.

c. Beispiele für Lösungen von Zellenproblemen.

Wir präsentieren hier kurz die Lösungen der Zellenprobleme für zwei wichtige Spezialfälle.

1. Schichtartige Inhomogenitäten.

Bereits in Abschnitt 4.1.4 haben wir schichtartige Inhomogenitäten behandelt und im vorigen Kapitel für numerische Untersuchungen genutzt. Die Matrix A hat hierbei die Form (3.6),

$$A(x) = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix}, \quad p(x) = \begin{cases} p(x) = p_1, & x_1 \in [\frac{1}{4}, \frac{3}{4}] \\ p(x) = p_2, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.40)$$

In diesem Fall sind die Lösungen von Zellenproblemen auch analytisch berechenbar [Bab76]. Während $\chi_2 \equiv 0$ ist, ist χ_1 stückweise linear. In Abbildung 4.3 ist das Ergebnis für $p_1 = 2$ und $p_2 = 1$ zu sehen. Bei unserer uniformen Triangulierung mit Rechtecken liegen Eckpunkte von Elementen entlang der

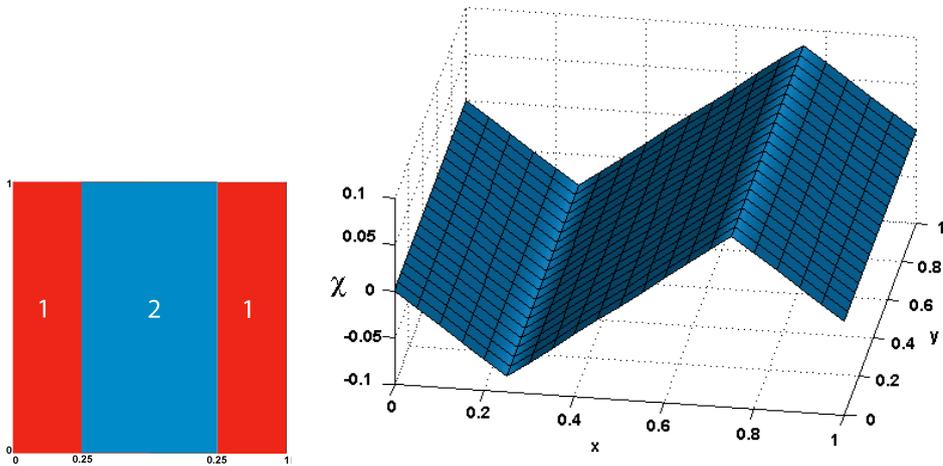


Abbildung 4.3: li.: Schematischer Aufbau der Koeffizientenmatrix, re.: erste Komponente der numerischen Lösung des Zellenproblems

Linien der Stetigkeitssprünge der ersten Ableitung der exakten Lösung; die Lösung mit linearen Finiten Elementen ist somit auch exakt.

Bemerkung. Man beachte, dass die Stetigkeitssprünge von A anders gewählt wurden als noch in (3.6). Aufgrund der periodischen Randbedingungen sollten die Stetigkeitssprünge in Normalenrichtung nicht auf dem Rand liegen.

2. Schachbrettartige Inhomogenitäten.

Einen weiteren sehr wichtigen Spezialfall markiert die schachbrettartige Inhomogenität der Form

$$A(x) = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix}, \quad p(x) = \begin{cases} p(x) = p_1, & x \in [0, \frac{1}{2}] \times [0, \frac{1}{2}] \\ p(x) = p_1, & x \in [\frac{1}{2}, 1] \times [\frac{1}{2}, 1] \\ p(x) = p_2, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.41)$$

für $p_1, p_2 > 0$. Inhomogenitäten dieser Art sind nach den schichtartigen die wichtigsten Modellbeispiele bei Untersuchungen im Zusammenhang mit Verbundwerkstoffen. Aus Symmetriegründen muss hierbei $\chi_1(x_1) = \chi_2(x_2)$ und $\chi_1(x_2) = \chi_2(x_1)$ gelten. In Abbildung 4.4 ist deshalb nur χ_1 für $p_1 = 1$ und $p_2 = 2$ dargestellt.

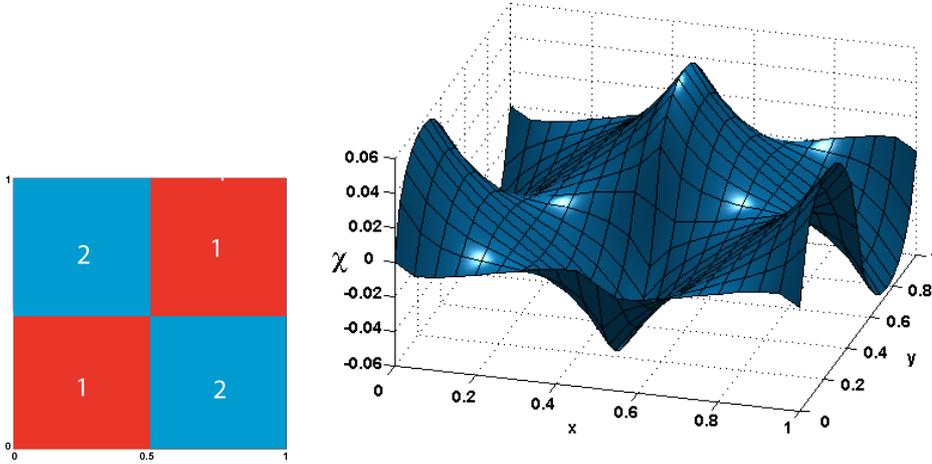


Abbildung 4.4: li.: Schematischer Aufbau der Koeffizientenmatrix, re.: erste Komponente der numerischen Lösung des Zellenproblems

4.3.2 Berechnung der homogenisierten Koeffizientenmatrix

Mithilfe des Zellenproblems ist die homogenisierte Matrix A^0 gemäß (4.17) implizit gegeben. Mit der Standardbasis $\{e_1, \dots, e_n\}$ berechnen wir A^0 gemäß

$$A^0 e_i = \int_Y A(y)(e_i + \nabla_y \chi_i) dy \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.42)$$

Es lässt sich zeigen, dass für $A^\varepsilon \in M(\alpha, \beta, \Omega)$ (siehe Def. 1.1) auch $A^0 \in M(\alpha, \beta, \Omega)$ gilt [AB05]. Zur numerischen Auswertung des Integrals eignen sich mehrdimensionale Gaußquadraturen, die man aus der bekannten eindimensionalen Gaußquadratur erhält, indem man diese auf jede Variable separat anwendet:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(x, y) dx dy &\approx \int_{-1}^1 \left(\sum_{i=1}^{m_1} f(\xi_i^1, y) w_i^1 \right) dy \\ &\approx \sum_{j=1}^{m_2} \sum_{i=1}^{m_1} f(\xi_i^1, \xi_j^2) w_i^1 w_j^2, \end{aligned}$$

wobei die ξ_i^1 bzw. ξ_j^2 die Gaußpunkte in x - bzw. y -Richtung und die w_i^1 bzw. w_j^2 die zugehörigen Gewichte sind. Diese Integration ist wegen der gleichförmigen Gitterstruktur unseres Rechteckgitters möglich und sinnvoll (siehe dazu auch [Hug00]).

Passende Gitterwahl.

Die Lösung des Zellenproblems für eine schachbrettartige Inhomogenität (vgl. voriger Abschnitt) sei auf einem regelmäßigen Vierecksgitter mit bilinearen Finiten Elementen berechnet. Nach standard Finite Elemente Analysis [Bra07]

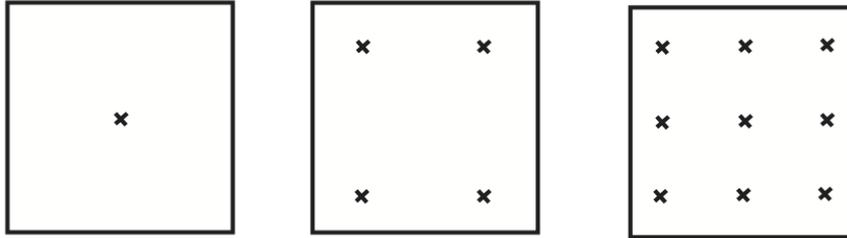


Abbildung 4.5: Gaußsche Quadraturpunkte für 1-Punkt, 2×2 -Punkt und 3×3 -Punkt.

konvergiert bei genügender Glätte der Lösung die Approximation mit der Ordnung 2 in $L^2(\Omega)$. Die Quadraturformel sollte also so gewählt sein, dass diese Ordnung erhalten bleibt.

Eine Konvergenzanalyse, bei der wir das Zellenproblem mit bilinearen Finiten Elementen und die Quadratur in (4.42) mit einer 2×2 -Gauß-Quadratur vorgenommen haben, ist in Abbildung 4.6 zu sehen. Hier wurde $\|A_h^0 - A^0\|_F$ gegen eine Folge von $h_i \rightarrow 0$ aufgetragen. Der auffällige unregelmäßige Verlauf ist auf eine ungeeignete Vorgehensweise bei der Quadratur zurückzuführen. Die Funktionen χ sind im Allgemeinen nicht stetig differenzierbar; die Sprungstellen in den Ableitungen fallen hierbei mit den Unstetigkeitsstellen der Koeffizienten in A zusammen. Nach dem BRAMBLE-HILBERT-LEMMA gilt nun für die 2×2 -Gauß-Quadratur

$$\left| \int_Y f(x) dx - Q_Y(f) \right| \leq ch^4 \|f^{(4)}\|_{L^1(Y)}$$

für eine genügend glatte Funktion. Bei achsenparallelen Kanten als Sprungstellen muss das Gitter also so gewählt werden, dass die Sprungstellen stets nur auf den Kanten der Elemente liegen. Abbildung 4.7 verdeutlicht dieses Vorgehen für schichtartige Inhomogenitäten. Eine Konvergenzstudie für schachbrettartige Inhomogenitäten unter der Nebenbedingung, dass die Kanten der Elemente genau auf den Unstetigkeitsstellen von A liegen, ist in Abbildung 4.8 zu sehen.

Beispiele

1. schichtartige Inhomogenität

Für eine schichtartige Inhomogenität ist die Lösung des Zellenproblems bekannt. Die Funktion χ_1 ist hierbei stückweise linear, χ_2 Null. Die Approximation mit bilinearen Finiten Elementen ist demnach für ein passendes Gitter nach obiger Beschreibung exakt, und somit auch die Quadratur mittels der 2×2 -Gauß-Quadratur. Selbst für ein Gitter mit $h = 0.25$ (vgl. Abb. 4.7 rechts) ist die berechnete Matrix A_h^0 also (bis auf Maschinengenauigkeit) exakt. Es ergibt sich für $p_1 = 1$ und $p_2 = 2$

$$A_h^0 = A^0 = \begin{pmatrix} \frac{5}{3} & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}.$$

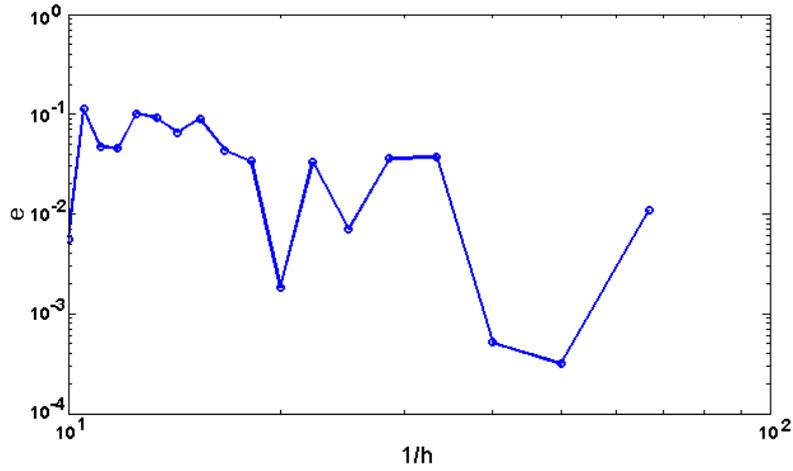


Abbildung 4.6: Konvergenzstudie für $\|A_h^0 - A^0\|_2$

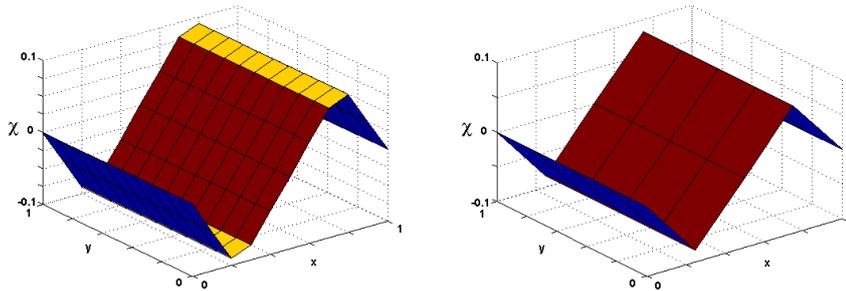


Abbildung 4.7: Beispiel einer ungünstigen (links) und einer günstigen Triangulierung (rechts), die Farbskala stellt die Ableitung in x_1 -Richtung dar.

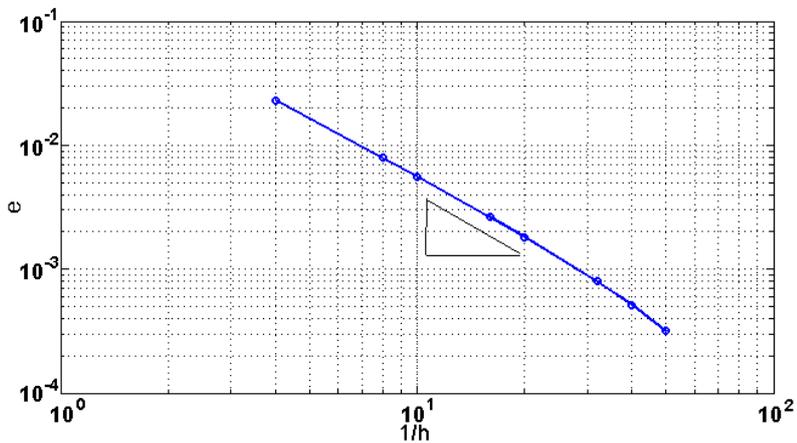


Abbildung 4.8: Konvergenzstudie für $\|A_h^0 - A^0\|_2$ mit passender Gitterwahl.

2. schachbrettartige Inhomogenität

Hier ergibt sich für $h = 0.01$, $p_1 = 1$ und $p_2 = 2$

$$A_h^0 = A^0 = \begin{pmatrix} 1.536 & 0 \\ 0 & 1.536 \end{pmatrix}.$$

Wegen der Symmetrie von χ_1 und χ_2 ist $a_{11}^0 = a_{22}^0$.

4.3.3 Lösung der homogenisierten Gleichung für das Modellproblem

Für das auch im Kapitel über MsFEM benutzte Modellbeispiel einer schichtartigen Inhomogenität (vgl. vorigen Abschnitt) können wir von einer exakten Lösung des Zellenproblems und einer exakten Auswertung des Integrals in (4.42) ausgehen. Wir wollen das Konvergenzverhalten für diesen Fall analysieren.

Satz 4.23 *Sei u^ε die Lösung des Modellproblems und u_h^0 die Finite Elemente Approximation der Lösung von (4.16), wobei $A_h^0 = A^0$ fehlerfrei bestimmt wurde. Dann gibt es Konstanten $C_1, C_2 > 0$, so dass*

$$\|u^\varepsilon - u_h^0\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 (\sqrt{\varepsilon} + h^2) \quad (4.43)$$

und

$$\|u^\varepsilon - (u_h^0 + \varepsilon u_h^1)\|_{H^1(\Omega)} \leq C_2 (\sqrt{\varepsilon} + h). \quad (4.44)$$

BEWEIS. Es gilt

$$\begin{aligned} \|u^\varepsilon - (u_h^0 + \varepsilon u_h^1)\|_{H^1(\Omega)} &= \|u^\varepsilon - u^0 - \varepsilon u_h^1 + u^0 - u_h^0\|_{H^1(\Omega)} \\ &\leq \|u^\varepsilon - (u^0 + \varepsilon u_h^1)\|_{H^1(\Omega)} + \|u^0 - u_h^0\|_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

für ein $C > 0$. Da wir χ und A^0 nach Voraussetzung exakt bestimmt haben, ist $u_h^1 = u^1$ und es gilt nach (4.25)

$$\begin{aligned} \|u^\varepsilon - (u_h^0 + \varepsilon u_h^1)\|_{H^1(\Omega)} &\leq \|u^\varepsilon - (u^0 + \varepsilon u^1)\|_{H^1(\Omega)} + \|u^0 - u_h^0\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C (\sqrt{\varepsilon} + h) \end{aligned}$$

und entsprechend

$$\|u^\varepsilon - u_h^0\|_{L^2(\Omega)} \leq C (\sqrt{\varepsilon} + h^2).$$

□

Wir sollten also beobachten, dass für festes ε der Fehler gegen einen konstanten Wert (> 0) konvergiert. Als Gebiet ist auch hier wieder $\Omega = (0, 1)^2$ und die rechte Seite $f(x) = -16\pi^2 \sin(2\pi x_1) \sin(2\pi x_2)$ gewählt. Der Korrekturterm sollte sich nur auf den Fehler in H^1 niederschlagen. Tatsächlich sind solche Verläufe für den L^2 - (Abb. 4.9) und H^1 -Fehler (Abb. 4.10) zu beobachten.

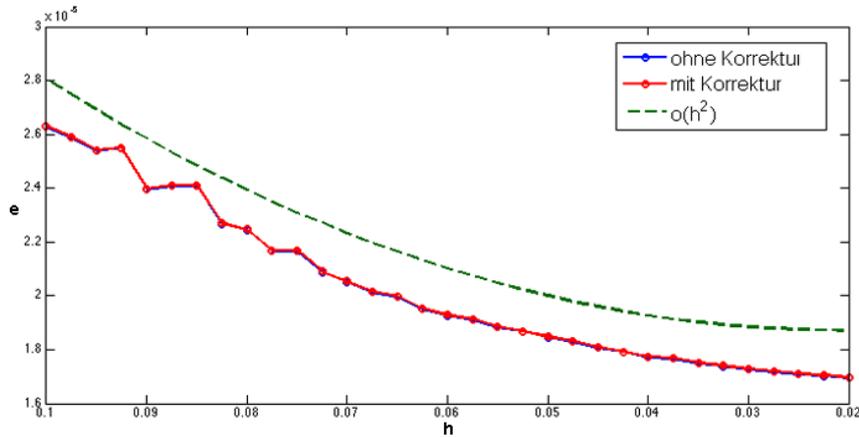


Abbildung 4.9: L^2 Konvergenzanalyse für das homogenisierte Problem, $h \in [\frac{1}{50}, \frac{1}{10}]$.

Die Lösungen werden bei allen Analysen mit einer sehr fein aufgelösten Referenzlösung des Originalproblems mit $h \ll \varepsilon$ verglichen. Für eine vollständige Konvergenzanalyse ist hierbei jedoch schnell wegen der Bedingung $h \ll \varepsilon$ eine Grenze der Rechenkapazität erreicht. Eine solche Analyse ist in Abbildung 4.11 zu sehen.

Bemerkung. Auf die bei Konvergenzstudien üblichen logarithmischen Achsenskalierungen zur Verdeutlichung kann bei diesen Problemen nicht zurück gegriffen werden, da nach Satz 4.23 $e \not\rightarrow 0$ für $h \rightarrow 0$ gilt und $\log(e)$ daher keine Gerade darstellt. Zur Verdeutlichung der Konvergenzgeschwindigkeit wurde deshalb in Abb. 4.9 eine quadratische Funktion $f = o(h^2)$ eingefügt.

Bemerkung. Eine gute Möglichkeit zur Parallelisierbarkeit ergibt sich bei der Berechnung des Zellenproblems, indem die einzelnen Komponenten χ_i , $i = 1, \dots, n$ parallel berechnet werden. Da es hier keinerlei Kommunikation geben muss, kann man etwa für den Fall $n = 2$ bei zwei parallelen Prozessoren von einer Halbierung der Rechenzeit ausgehen. Bei komplizierten Inhomogenitäten, die eine sehr feine Gitterwahl für eine genaue Berechnung von A^0 erfordern, kann dies von großem Vorteil sein.

4.3.4 Adaptive Homogenisierung

In Abschnitt 2.5 haben wir bereits die Methode der R-Adaptivität beschrieben. Im Zusammenhang mit der numerischen Homogenisierung wollen wir nun ein besonderes Verfahren zur R-Adaptivität beschreiben, welches wir *adaptive Homogenisierung* nennen wollen. Diese Bezeichnung ist irreführend: durch die Bestimmung von A_h^0 ist der Prozess der Homogenisierung gegeben, etwas wie *mehr oder weniger homogenisieren* kann also nicht existieren.

Wir benötigen ein adäquates Fehlermaß, welches zur Beurteilung, wo und wie

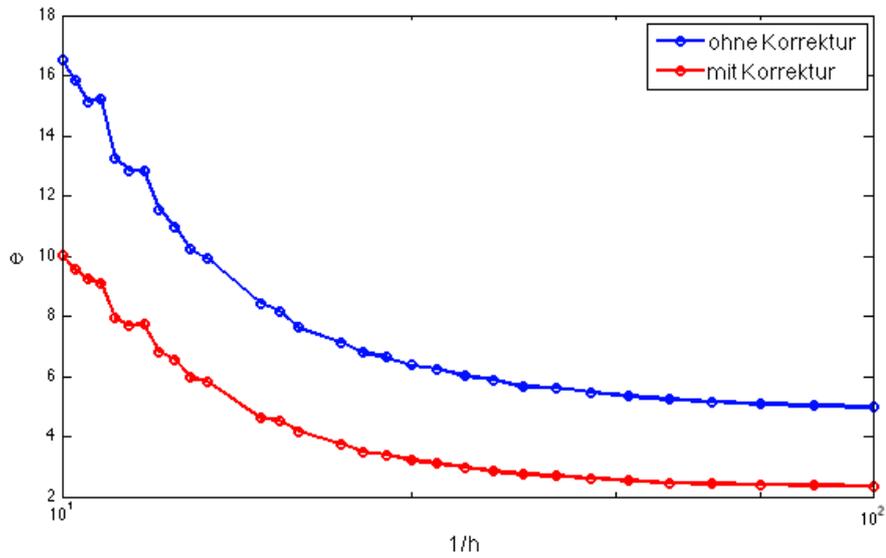


Abbildung 4.10: H^1 -Konvergenzanalyse für das homogenisierte Problem, $h \in [\frac{1}{50}, \frac{1}{10}]$. Das Addieren der Korrektur erster Ordnung verbessert den Fehler sichtbar.

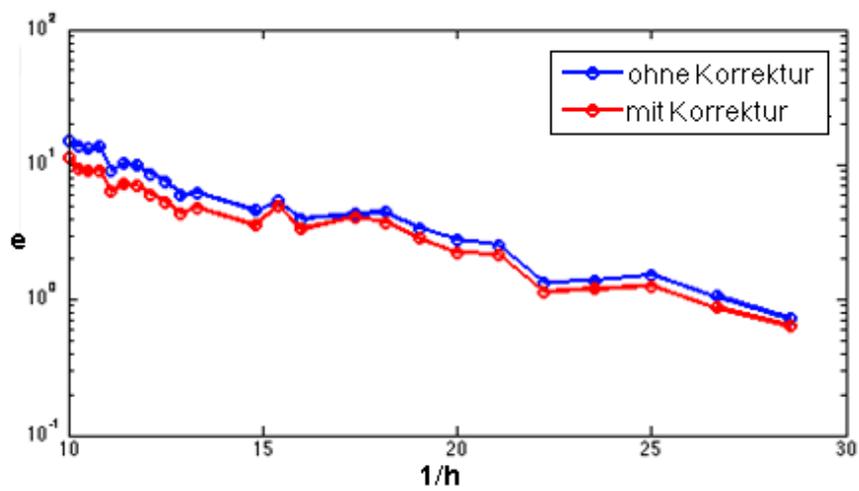


Abbildung 4.11: H^1 Konvergenzanalyse für $\varepsilon \rightarrow 0$ mit $h = \frac{1}{4}\varepsilon$

stark verfeinert werden soll, herangezogen wird. A posteriori Abschätzungen dieser Art existieren zahlreich. Ein natürlicher und einfacher Fehlerschätzer ist der *residuale Fehlerschätzer*.

Klassische Residuale Fehlerschätzer

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische und positiv definite Matrix. Für das Problem

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A\nabla u) = f & \text{in } \Omega \\ u = 0 & \text{auf } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.45)$$

lautet mit $a(u, v) = \int_{\Omega} A\nabla u \nabla v \, dx$ und $L(v) = \int_{\Omega} f \cdot v \, dx$ die schwache Formulierung

$$a(u, \phi) = L(\phi) \quad \forall \phi \in V = H_0^1(\Omega). \quad (4.46)$$

Sei nun \mathcal{T}_h eine Triangulierung von Ω und \mathcal{E}_h^0 die Menge aller inneren Kanten von \mathcal{T}_h . Für eine Finite Elemente Approximation $u_h \in V_h = \{v \in V \mid v|_{\tau} \in P^1(\tau) \forall \tau \in \mathcal{T}_h\}$ gilt nun

$$a(u_h, \phi) = L(\phi) \quad \forall \phi \in V_h. \quad (4.47)$$

Aus (4.46) und (4.47) folgt nun

$$a(u_h - u, \phi) = L(\phi) - a(u_h, \phi) \quad \forall \phi \in V \quad (4.48)$$

und die rechte Seite definiert ein Residuum als Element des Dualraumes $V' = H^{-1}(\Omega)$ von V . Mit der Greenschen Formel und da wegen der zellenweise Linearität $\operatorname{div} A\nabla u_h = 0$ auf jeder Zelle $\tau \in \mathcal{T}_h$ gilt, erhalten wir

$$\begin{aligned} L(\phi) - a(u_h, \phi) &= L(\phi) - \sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} (A\nabla u_h, \nabla \phi) \\ &= (f, \phi) - \sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} [(A\nabla u_h \cdot \vec{n}_{\tau}, \phi) - (\operatorname{div}(A\nabla u_h), \phi)] \\ &= (f, \phi) + \sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} (\operatorname{div}(A\nabla u_h), \phi) - \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} ([A\nabla u_h \cdot \vec{n}]_e, \phi) \\ &= (f, \phi) - \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} ([A\nabla u_h \cdot \vec{n}]_e, \phi), \end{aligned} \quad (4.49)$$

wobei \vec{n} das äußere Normalenvektorfeld und $[A\nabla u_h \cdot \vec{n}]_e$ den Sprung der Normalenableitungen an den Dreiecken mit gemeinsamer Kante e kennzeichne. Dies suggeriert die folgende Definition.

Definition 4.24 *Mit den obigen Bezeichnungen definieren wir zellenweise den residualen Fehlerschätzer als*

$$\mathcal{R}_{\tau} = \left(h_{\tau}^2 \|f\|_{L^2(\tau)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{e \cap \partial\tau \in \mathcal{E}_h^0} h_e \|[A\nabla u_h \cdot \vec{n}]_e\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Lemma 4.25 *Es existiert eine nur vom Gebiet Ω und der Triangulierung abhängige Konstante $C > 0$, so dass*

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C \sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} \mathcal{R}_\tau^2. \quad (4.50)$$

BEWEIS. Da der Rand $\partial\Omega$ eine positive Länge besitzt, gilt die Poincaré-Ungleichung,

$$\|v\|_{L^2(\Omega)} \leq C(\Omega) \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} \quad \forall v \in V, \quad (4.51)$$

und damit folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 + C^2(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)} &\leq \sup\{a(v, w) \mid w \in V, \|w\|_{H^1(\Omega)} = 1\} \\ &\leq \|v\|_{H^1(\Omega)}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

aus (4.51) und der Cauchy-Schwarz-Ungleichung. Damit gilt

$$\begin{aligned} \sup\{L(v) - a(u_h, v) \mid v \in V, \|v\|_{H^1(\Omega)} = 1\} \\ &\leq \|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \\ &\leq (1 + C^2(\Omega)) \sup\{L(v) - a(u_h, v) \mid v \in V, \|v\|_{H^1(\Omega)} = 1\}. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Aufgrund der Dualität ist der Supremumsterm gleich der Norm des Residuums (4.48) im Dualraum V' von V . Nun existiert nach [AO00] eine Interpolation vom *Clément*-Typ, also zu $u \in H_0^1(\Omega)$ ein $i_h u$ mit

$$\|u - i_h u\|_{H^1(\tau)} \leq C \|u\|_{H^1(\tilde{\tau})} \quad (4.54)$$

$$\|u - i_h u\|_{L^2(\tau)} \leq C h_\tau \|\nabla u\|_{L^2(\tilde{\tau})} \quad (4.55)$$

$$\|u - i_h u\|_{L^2(e)} \leq C h_e^{1/2} \|\nabla u\|_{L^2(\tilde{\tau})}. \quad (4.56)$$

Hierbei ist $\tilde{\tau}$ die Menge aller zu τ benachbarter Elemente. Hiermit gilt

$$\begin{aligned} L(v) - a(u_h, v) &= L(v - i_h v) - a(u_h, v - i_h v) \\ &\leq \sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} \|f\|_{L^2(\tau)} \|v - i_h v\|_{L^2(\tau)} + \|\operatorname{div}(A\nabla u_h)\|_{L^2(\tau)} \|v - i_h v\|_{L^2(\tau)} \\ &\quad - \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} \|[A\nabla u_h \cdot \vec{n}]_e\|_{L^2(e)} \|v - i_h v\|_{L^2(e)} \\ &\leq \sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} h_\tau \|f\|_{L^2(\tau)} \|\nabla v\|_{L^2(\tau)} + h_\tau \|\operatorname{div}(A\nabla u_h)\|_{L^2(\tau)} \|\nabla v\|_{L^2(\tau)} \\ &\quad - \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} h_e^{1/2} \|[A\nabla u_h \cdot \vec{n}]_e\|_{L^2(e)} \|\nabla v\|_{L^2(e)} \\ &\leq \sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} h_\tau \|f\|_{L^2(\tau)} \|\nabla v\|_{L^2(\tau)} - \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} h_e^{1/2} \|[A\nabla u_h \cdot \vec{n}]_e\|_{L^2(e)} \|\nabla v\|_{L^2(e)}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Indem wir dies in (4.53) einsetzen, folgt die Behauptung. \square

Oszillierende Residuale Fehlerschätzer

Es stellt sich nun die Frage, wie wir einen residualen Fehlerschätzer für u_h^0 und $(u_h^0 + \varepsilon u_h^1)$ formulieren können. Da u^0 die Lösung der homogenisierten Gleichung ist, bietet sich ein Fehlerschätzer wie in Definition 4.24 an. Dabei wird jedoch außer acht gelassen, dass wir mit u_h^0 eigentlich eine Näherung für das Modellproblem (4.5) angeben. Dies ist nach der Addition der Korrektur umso bedeutender, da $(u_h^0 + \varepsilon u_h^1)$ i.A. nicht die Bestapproximation in V_h zu u^ε darstellt. Im Vergleich zu Lemma 4.25 müssen wir also mit einem zusätzlichen Konsistenzfehler arbeiten.

Die schwache Formulierung zur Modellgleichung (4.5) ist mit

$$a^\varepsilon(u, v) = \int_{\Omega} A^\varepsilon \nabla u \nabla v \, dx \quad \text{und} \quad L(v) = \int_{\Omega} f v \, dx$$

gegeben durch

$$a^\varepsilon(u^\varepsilon, \phi) = L(\phi) \quad \forall \phi \in V = H_0^1(\Omega). \quad (4.58)$$

Die Definition des Residuums muss im Vergleich zu (4.24) um einen Term erweitert werden, da nicht $\text{div}(A \nabla u_h)|_\tau = 0$ für $\tau \in \mathcal{T}_h$ gilt.

Definition 4.26 Sei u_h^0 die Finite Elemente Approximation des homogenisierten Problems (4.16), u_h^1 die Korrektur erster Ordnung nach (4.24) und u^ε die Lösung von (4.5). Ferner sei \mathcal{T}_h eine Triangulierung von Ω . Dann definieren wir den oszillierenden residualen Fehlerschätzer zellenweise als

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_\tau^\varepsilon = & \left(h_\tau^2 \|f\|_{L^2(\tau)}^2 + h_\tau^2 \|\text{div}(A^\varepsilon \nabla(u_h^0 + \varepsilon u_h^1))\|_{L^2(\tau)}^2 \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \sum_{e \in \partial\tau \cap \mathcal{E}_h^0} h_e \|[A^\varepsilon \nabla(u_h^0 + \varepsilon u_h^1) \cdot \vec{n}]_e\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Satz 4.27 (Adaptive residuale Homogenisierung) Sei u^ε die Lösung der Modellgleichung (4.5) und $\tilde{u}_h^\varepsilon = u_h^0 + \varepsilon u_h^1$ die Lösung der homogenisierten Gleichung (4.16) mit Korrekturterm (4.24). Dann gibt es für den oszillierenden residualen Fehlerschätzer (4.59) eine Konstante $C > 0$, so dass gilt

$$\|u^\varepsilon - \tilde{u}_h^\varepsilon\|_{H^1} \leq C \left(\sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{R}_\tau^\varepsilon)^2 + \sqrt{\varepsilon} + h \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.60)$$

BEWEIS. Der Beweis verläuft im Wesentlichen analog zum Beweis von Lemma 4.25. Wir müssen zusätzlich den Konsistenzfehler beachten:

$$\begin{aligned} a^\varepsilon(u^\varepsilon - \tilde{u}_h^\varepsilon, v - i_h v) & \leq C \|u^\varepsilon - \tilde{u}_h^\varepsilon\|_{H^1(\tau)} \|v - i_h v\|_{H^1(\tau)} \\ & \leq C \|u^\varepsilon - \tilde{u}_h^\varepsilon\|_{H^1(\tau)} \|v\|_{H^1(\tau)} \\ & \leq C (\sqrt{\varepsilon} + h_\tau) \|v\|_{H^1(\tau)} \end{aligned} \quad (4.61)$$

wegen (4.54) und Satz 4.23. Hiermit folgt mit den Mitteln aus dem Beweis von Lemma 4.25 die Behauptung. \square

Numerische Anwendung

Im Falle der h -Adaptivität kann die lokale Größe des residualen Fehlerschätzers zur Beurteilung benutzt werden, an welchen Stellen das Gitter verfeinert werden soll. Dadurch wird die Anzahl der Freiheitsgrade in der Regel erhöht (wenn nicht vergrößert wird). Für die Methode der R-Adaptivität benutzen wir den Fehlerschätzer (nach einer Umskalierung) als Dichtefunktion für die anschließende Verzerrung des Gitters (vgl. Abschnitt 2.5).

Zu beachten ist hierbei, dass wir die Anzahl der Freiheitsgrade durch diesen Prozess nicht verändern. Dadurch verfeinern wir das Gebiet nicht nur in den Bereichen höheren Fehlers, sondern vergrößern es automatisch damit in den Bereichen niedrigen Fehlers. Es gilt demnach zu beachten, dass die Umstrukturierung des Gitters zugunsten der Feinheit in Bereichen hohen Fehlers nicht zulasten des globalen Fehlers geht.

Wir stellen uns also die Aufgabe, eine Triangulierung von Ω zu finden, unter der

$$\mathcal{R}_{\mathcal{T}_h}^\varepsilon = \left(\sum_{\tau \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{R}_\tau^\varepsilon)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.62)$$

minimal ist. Um dieses Problem möglichst zu vereinfachen, formulieren wir es geeignet um.

Sei \mathcal{T}_h^0 unser Ausgangsgitter und o.B.d.A. uniform mit Schrittweite h . Hierzu sei $\mathcal{R}_{\mathcal{T}_h^0}^\varepsilon$ das Residuum unserer Finite Elemente Lösung, welches wir als stückweise konstante Funktion auf Ω auffassen wollen. Weiter sei mit $b > 1$ durch

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\mathcal{T}_h^0}^\varepsilon(b) = \left(\frac{\mathcal{R}_{\mathcal{T}_h^0}^\varepsilon - \min(\mathcal{R}_{\mathcal{T}_h^0}^\varepsilon)}{\max(\mathcal{R}_{\mathcal{T}_h^0}^\varepsilon) - \min(\mathcal{R}_{\mathcal{T}_h^0}^\varepsilon)} \right) (b - 1) + 1$$

das auf das Intervall $[1, b]$ reskalierte Residuum erklärt. Die für die Reorientierung des Gitters nach Algorithmus 2.2 notwendige und zum oszillierenden Residuum assoziierte Dichtefunktion ist nun gegeben durch

$$h_\Omega^b = \left(\tilde{\mathcal{R}}_{\mathcal{T}_h^0}^\varepsilon \right)^{-1}. \quad (4.63)$$

Es gilt offenbar $h_\Omega^b : \Omega \rightarrow [\frac{1}{b}, 1]$.

Das durch den Algorithmus 2.2 verformte Gitter hat somit minimale Gitterweite h/b . Gesucht ist nun also ein $b > 0$, unter der die Verformung ein Gitter liefert, dessen Lösung ein minimales Residuum (4.62) besitzt.

Problematisch bei der Anwendung von Verfahren zur Optimierung dieses Parameters ist die Tatsache, dass die Bestimmung eines optimalen Gitters dadurch in der Regel mehr Zeit benötigt, als von vornherein das Lösen der Gleichung auf einem viel feineren uniformen Gitter benötigt hätte. In der Praxis wird

daher meist auf eine feste Zahl b zurückgegriffen.

Beispiel. Wir verwenden den oszillierenden residualen Fehlerschätzer, um für eine schachbrettartige Inhomogenität das Modellproblem auf dem Einheitsquadrat zu diskutieren.

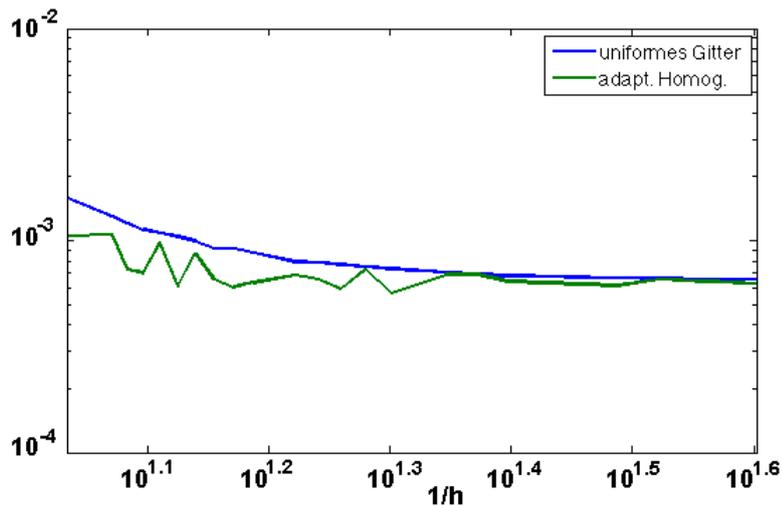


Abbildung 4.12: H^1 -Konvergenzstudie zur r -adaptiven Homogenisierung. Im Vergleich uniforme Gitterwahl (blau) und r -adaptive Homogenisierung (grün).

Wie in Abbildung 4.12 zu sehen ist, wird der Fehler im Vergleich zur uniformen Triangulierung bei gleicher Knotenzahl verkleinert. In diesem Fall haben wir $b = 3$ gewählt. Da wir auf diese Weise nicht für jedes Gitter die optimale Knotenverteilung erreichen, ist der Fehlerverlauf erkennbar unregelmäßig. Durch eine bessere Wahl von b liesse sich auch für kleinere Schrittweiten eine Verbesserung erzielen.

Kapitel 5

Ein realistisches Beispiel

In der Regel stammen konkrete Multiskalenprobleme aus angewandten Bereichen; im Gegensatz dazu ist die Theorie der Homogenisierung ein recht abstrakter Bereich der partiellen Differentialgleichungen. So lässt sich der große Mangel an realistischen Beispielen der Anwendung der numerischen Homogenisierung erklären. Unser Anspruch in diesem Kapitel ist es, ein *quasirealistisches* Beispiel zu motivieren und die im Vorfeld an Modellproblemen untersuchten Verfahren daran zu vergleichen. Die Umsetzung eines vollen realen Problems, z.B. aus den Ingenieurwissenschaften, erfordert meist ein hohes Maß an Aufwand bei der Kompilierung der erhaltenen Daten; es müssen z.B. die zugrunde liegenden Gebiete und Materialgesetze von ihrem aktuellen Format (CAD etc.) in die benutzte Programmierumgebung konvertiert werden. Aus diesem Grund legen wir im Folgenden ein Problem vor, welches alle Charakteristiken eines realistischen Problem besitzt, jedoch kein *echtes* Problem darstellt.

5.1 Motivation

Unsere ursprüngliche Motivation dieses Themas war für uns ein persönliches Interesse an der Verformungsmechanik eines Werkstückes aus Kohlefaserverbund (Carbon). Hier werden ultrafeine Fäden aus Kohlenstoff in einer Matrix aus Epoxydharz auf unterschiedlichste Arten gelegt oder gewebt. Ursprünglich wollte man mit der kreuzweisen Verwebung der Kohlefasern die Eigenschaften eines homogenen Werkstoffes (z.B. Aluminium) simulieren, gleichzeitig aber Gewicht sparen. Auch wegen der großen Möglichkeiten der Freiformgestaltung war Carbon für die Luft- und Raumfahrt so wie für die Gestaltung und Konstruktion von Sportgeräten sehr geeignet, da sich damit sehr viel Gewicht einsparen lässt. Im weiteren Verlauf erkannte man in der Eigenschaft von unilinearen Verbunden, in einer Richtung sehr steif und in einer anderen nachgiebig zu sein, große Möglichkeiten. So lässt sich ein Werkstück so konzipieren, dass es in einer gegebenen Vorzugsrichtung eine hohe Steifigkeit, in einer anderen jedoch Dämpfungseigenschaften besitzt.

Triangulierung

Um die Ansprüche eines realen Anwendungsproblems korrekt wiederzugeben, legen wir hier großen Wert auf die Wahl einer komplizierten Geometrie. In Abschnitt 2.6 haben wir bereits die Triangulierung einer Rennradkurbel vorgenommen, wie sie in Abbildung 5.1 zu sehen ist. Die Triangulierung eines solchen Gebietes sollte im Hinblick auf die Anwendung für die Finite Elemente Methode folgenden Anforderungen genügen:

- Gute Auflösung *detailreicher* Regionen des Gebietes, gleichzeitig
- nicht zu hohe Anzahl an Knotenpunkten,
- möglichst hohe Qualität des Gitters.

Wie wir in Abschnitt 2.4 bemerkten, hat die Qualität des Gitters direkte Auswirkungen auf die Genauigkeit unserer Lösung.



Abbildung 5.1: Eine Campagnolo Record Ultra Torque Rennradkurbel als Gebiet.

Die resultierende Triangulierung enthält einige problematische Elemente, für die z.T. $q < 10^{-3}$ gilt (Abb. 5.2). Diese können durch einen Postprozess entfernt werden, indem zunächst Elemente entfernt werden, für die alle drei Eckpunkte auf dem Rand liegen. Die meisten problematischen Elemente erfüllen diese Eigenschaft und liefern (bei homogen Randbedingungen) ohnehin keinen Beitrag zur Lösung. Bei den übrigen problematischen Elementen tauchen in der Praxis hauptsächlich zwei Probleme im späteren Verlauf auf:

1. Für ein degeneriertes Element mit q_τ gilt auch

$$\cos(\alpha) \approx 1$$

für einen Innenwinkel α des Dreiecks. Der Flächeninhalt eines solchen Dreiecks ist ≈ 0 , so dass die resultierende Steifigkeitsmatrix irregulär wird.

2. Für sehr flache Elemente dieser Art gelingt die Retriangulierung bei der MsFEM nicht: die Multiskalen Basisfunktion kann nicht korrekt berechnet werden.

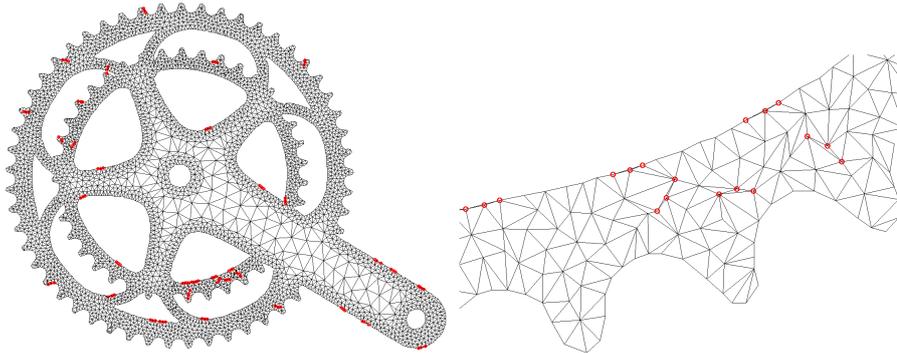


Abbildung 5.2: Degenerierte Elemente mit kleiner Qualitätszahl $q < 10^{-3}$ (rechts: Ausschnitt).

Randwerte

Mittels der Techniken, die in Kapitel 2 beschrieben sind, erhalten wir Methoden, die es uns über die Bildbearbeitung erlauben, differenzierte Randwerte vorzugeben. Wir wollen in unserem Fall lediglich auf einem Teilrand homogene Dirichletrandwerte fordern. Diese sind in Abbildung 5.3 rot gekennzeichnet und werden auf diese Weise an das Gitter weitergegeben.

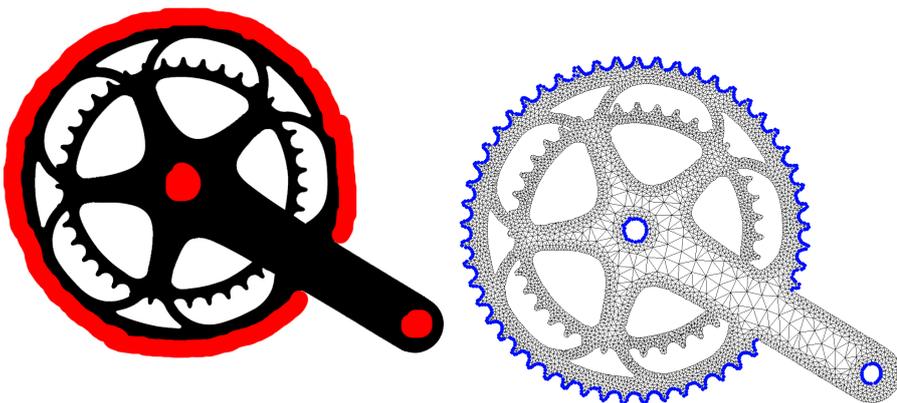


Abbildung 5.3: Homogene Dirichletrandwerte, auf dem Bild gekennzeichnet (links) und resultierende Randwerte in blau (rechts).

Inhomogene Koeffizientenmatrix

Sogenannte *unilineare* Kohlefasern können einfach mit schichtartigen Inhomogenitäten simuliert werden. Wir wollen hier verwebte Fasern simulieren und

wählen eine Koeffizientenmatrix der Form

$$A(x) = \begin{pmatrix} p(x) & 0 \\ 0 & p(x) \end{pmatrix}, \quad p(x) = \begin{cases} s(ax_1), & x \in [0, \frac{1}{2}]^2 \cup [\frac{1}{2}, 1]^2 \\ s(ax_2) & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.1)$$

mit der 1-periodischen Funktion s , die auf dem Einheitsintervall gegeben ist durch

$$s : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, \quad s(t) = \begin{cases} p_1, & t \in [0, \frac{1}{2}) \\ p_2, & t \in [\frac{1}{2}, 1]. \end{cases} \quad (5.2)$$

p_1 und p_2 repräsentieren die Materialkonstanten der beiden Werkstoffe, a ist die Anzahl der Fasern, die pro "Masche" verwebt werden. Der Fall $p_1 = 1$, $p_2 = 2$ und $a = 5$ ist in Abbildung 5.4 illustriert.

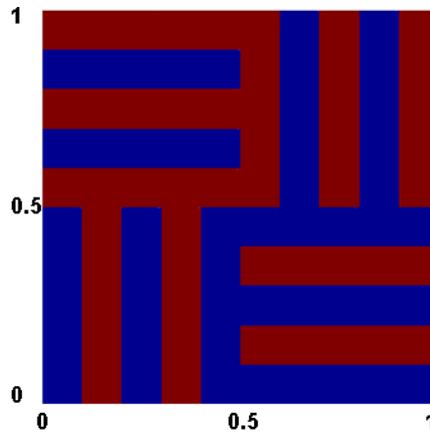


Abbildung 5.4: Struktur der inhomogenen Matrix $A = A^1$ auf der Einheitszelle (rot= p_1 , blau= p_2).

5.2 Lösung mit der Multiskalen Finite Elemente Methode

Wir verwenden als rechte Seite künftig immer $f \equiv 1$. Die Lösung durch die MsFEM ist in Abbildung 5.5 zu sehen. Wir verwenden hierfür $\varepsilon = 0.05$ und $h_{\text{rel}}^0 = 0.1$.

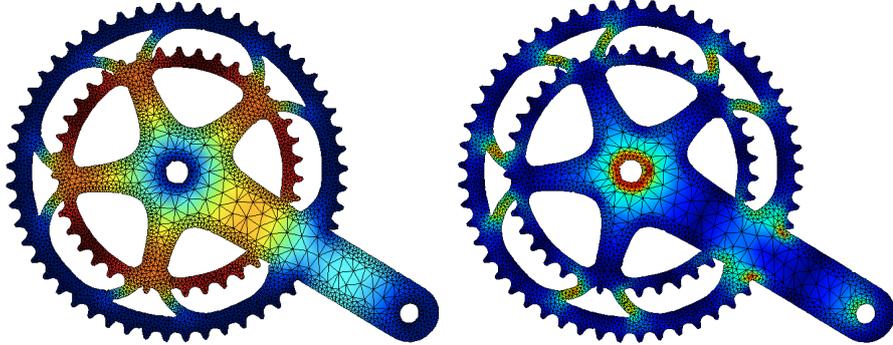


Abbildung 5.5: Lösung des Problems durch die MsFEM. Links: Farbskalierung nach Lösung u , rechts: Farbskalierung nach Ableitung $|Du|$

Bei der Lösung mit der MsFEM interessieren wir uns vorrangig für die Rechenzeiten, die mit den Möglichkeiten der Parallelrechnung erzielt werden. Für die hier vorgestellte Rechnung mit 7493 Elementen erhalten wir die folgenden Zeiten:

#Proz.	1	2	3	4
t (sec)	7052	3517	2587	1891

Die Rechenzeiten verhalten sich also in etwa wie vorhergesehen, da der parallelisierte Anteil aus der Berechnung der Basiselemente besteht; diese machen den Hauptaufwand der Methode aus.

5.3 Lösung durch numerische Homogenisierung

Bei der Lösung durch numerische Homogenisierung haben wir über die Analyse der bloßen Lösung noch Gelegenheit, durch Studium des Zellenproblems und der homogenisierten Matrix A^0 mehr über bestimmte qualitative Eigenschaften des Problems zu erfahren.

Lösung des Zellenproblems

Wir erhalten wegen der Symmetrie der Koeffizientenmatrix (5.1) auch Symmetrien in den Lösungen des Zellenproblems: $\chi_1(x_2) = \chi_2(x_1)$. Auch hier ist wieder darauf zu achten, dass die Unstetigkeitssprünge in A entlang von Kanten der Triangulierung liegen. Dies legt in unserem Fall ($a = 5$) Gitterweiten $h = 0.1, 0.05, 0.025, 0.01, \dots$ nahe. Eine solche Lösung mit $h = 0.01$ ist in Abbildung 5.6 dargestellt. Zur Illustration der Funktionsweise ist dort auch ein Zellenproblem für den Fall $a = 10$ zu sehen.

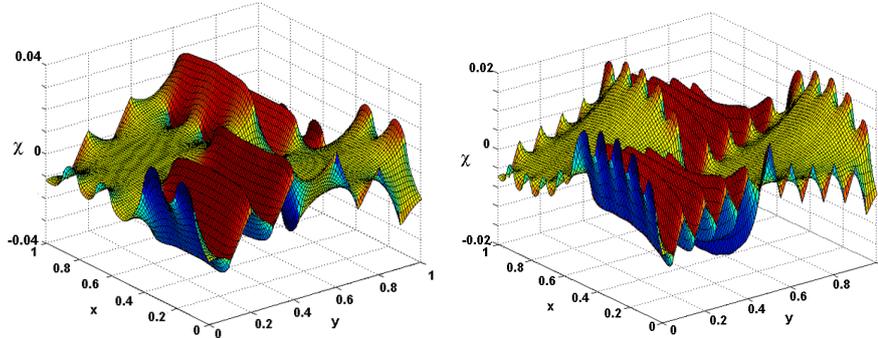


Abbildung 5.6: Lösungen des Zellenproblems für $a = 5$ (links) und $a = 10$ (rechts).

Homogenisiertes Problem

Mit den Lösungen berechnet sich in diesem Fall die Matrix A_h^0 zu

$$A_h^0 = \begin{pmatrix} 1.5857 & 0 \\ 0 & 1.5857 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix ist also hierbei auch wieder ein Vielfaches der Einheitsmatrix, welches auf ein (nahezu) isotropes Verhalten von Faserverbundwerkstoffen, die auf diese Art aufgebaut sind, hindeutet.

Der Vergleich mit schichtartigen Inhomogenitäten zeigt den speziellen Charakter von Verbundwerkstoffen unidirektionaler Natur auf: diese sind in einer Vorzugsrichtung steifer als in Gegenrichtung, da die Werte in der Diagonalen der homogenisierten Matrix bei schichtartigen Inhomogenitäten voneinander abweichen.

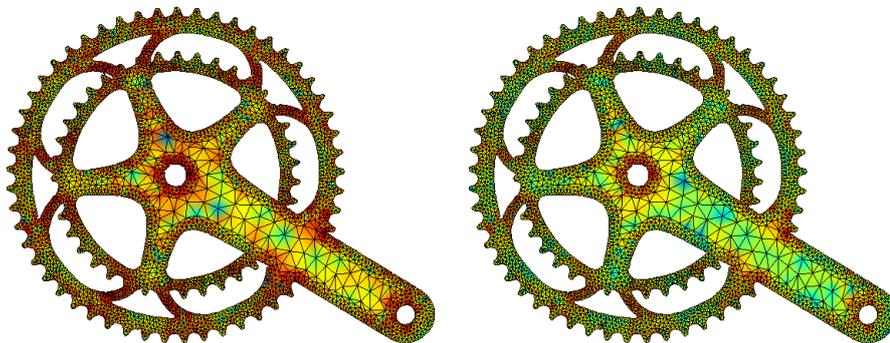


Abbildung 5.7: Verteilung des residualen Fehlerschätzers vor (links) und nach (rechts) Anwendung der adaptiven Homogenisierung. Es sind nur kleinere Unterschiede auszumachen, da größere gewünschte Veränderungen des Gitters schnell zu Instabilitäten beim Gitteralgorithmus führen.

Adaptive Homogenisierung

Zur Triangulierung des Gebietes haben wir bereits eine nichtkonstante Dichtefunktion der Form

$$h_{\Omega}(x) = (d(x, \partial\Omega) + 1)^2$$

benutzt, um die Feinheiten am Rand zu gewährleisten, ohne die Gesamtzahl an Knoten unnötig zu erhöhen. Das aus der Lösung berechnete oszillierende Residuum verändert die Dichteverteilung der Punkte schließlich kaum, so dass diese auf der Abbildung kaum erkennbar ist und auch nur zu einer eher kleinen Veränderung des gesamten Residuums führt (siehe Abb. 5.7):

$$\mathcal{R}_{\mathcal{T}_h^0}^{\varepsilon} = 543.97 \quad \text{und} \quad \mathcal{R}_{\mathcal{T}_h^1}^{\varepsilon} = 535.26.$$

Auf eine starke Gewichtung des Residuums ($b > 2$ in (4.63)) musste hierbei aus Stabilitätsgründen verzichtet werden, da der Gitteralgorithmus in unseren Tests ansonsten häufig durch extrem degenerierte Gitter abbrach.

Kapitel 6

Zusammenfassung

In verschiedenen Bereichen wissenschaftlicher Forschung ist die Lösung von Multiskalenproblemen in den letzten Jahrzehnten behandelt worden. Die Schwierigkeit besteht in den zu vielen Freiheitsgraden, die durch eine dem Problem angemessene Vernetzung zur Lösung mit Finiten Elementen entstehen. Aus den verschiedenen Quellen sind eine große Zahl an unterschiedlichen Methoden zu deren Behandlung gewachsen. Die meisten dieser Methoden sind rein heuristisch und deren Güte mathematisch schwer zu analysieren.

Wir haben in der vorliegenden Arbeit einen kurzen Überblick über die Ideen dieser Methoden gegeben und zunächst mit der Multiskalen Finiten Elemente Methode ein häufig angewandtes und mathematisch legitimierbares Verfahren wiedergegeben. Diese Methode löst das Problem der zu vielen Freiheitsgrade durch eine spezielle Finite Elemente Basis, die die mikroskopischen Oszillationen berücksichtigt und geht auf Hou und Wu zurück [HW97]. Die in dem gesamten Prozess benutzte Anzahl an Freiheitsgraden wird dadurch nicht gesenkt, da zur Berechnung der Basis, selbst bei periodischen Inhomogenitäten, eine feine Skala herangezogen werden muss. Wir haben in Kapitel 3 gezeigt, dass diese feine Skala eine vom Oszillationsparameter und der groben Skala abhängende Kleinheitsbedingung erfüllen muss, um die volle Konvergenz zu gewährleisten.

Wir konnten zeigen, dass neben dieser Bedingung ein großer Nachteil in den sehr hohen Rechenzeiten dieses Verfahrens liegt. Diese kann aber durch einfache Parallelisierungen drastisch gesenkt werden.

Zusätzlich haben wir einige Schwierigkeiten bei der Umsetzung der MsFEM besprochen, die in der Literatur wenig Erwähnung finden.

Nicht zuletzt auch zum Beweis der Konvergenz der MsFEM haben wir in Kapitel 4 die wichtigsten Konstrukte und Resultate der Homogenisierungstheorie zusammengefasst. Der Ansatz der Homogenisierungstheorie ist, die stark ortsabhängige Gleichung durch eine homogenisierte Gleichung zu ersetzen, die die qualitativen Eigenschaften in adäquater Form beinhaltet. Bezüglich des oszillierenden Parameters soll diese homogenisierte Gleichung als eine *Grenzgleichung* fungieren; hierzu haben wir mit der Zweiskalenkonvergenz einen pas-

senden Konvergenzbegriff angegeben, der auf Allaire zurückgeht [All92]. Wir konnten die Lösung der homogenisierten Gleichung auf diese Weise mathematisch stringent in Bezug zur oszillierenden Gleichung setzen.

Wir haben die einzelnen Schritte zur Bestimmung der homogenisierten Gleichung wiedergegeben und insbesondere Eigenschaften des dazu notwendigen *Zellenproblems* diskutiert, welches die qualitativen Eigenschaften der Mikroskala in das homogenisierte Problem übertragen soll. Darüber hinaus ist damit ein Korrekturterm gegeben, der die Konvergenzeigenschaften insb. in der H^1 -Norm verbessert. Dennoch erscheint die Konvergenzrate nicht optimal, was wir nach neueren Resultaten in Zusammenhang mit Randschichten bringen konnten.

Unser Hauptaugenmerk in dieser Arbeit war es, durch die Homogenisierungstheorie eine direkte numerische Methode zur Lösung von Multiskalenproblemen mit Finiten Elementen zu erhalten. Diese *numerische Homogenisierung* wurde in der zweiten Hälfte des vierten Kapitels konstruiert. Nachdem wir insbesondere die Lösung des Zellenproblems an wichtigen Beispielen diskutierten und auf die Notwendigkeit einer geeigneten Integrationsstrategie bei der Berechnung der homogenen Koeffizientenmatrix hingewiesen haben, konnten wir a priori Abschätzungen für den Fehlerverlauf der numerischen Homogenisierung angeben.

Die Theorie der Homogenisierung haben wir zudem genutzt, um einen Beweis der Konvergenz der MsFEM zu präsentieren, der auch die Effekte der kleinen Skala berücksichtigt und somit die Kleinheitsbedingung aus Kapitel 3 impliziert. Dieser Beweis geht auf Allaire und Brizzi zurück [AB05]. Hiermit konnte auch eine Verbindung zwischen MsFEM und numerischer Homogenisierung aufgezeigt werden, nach der die Multiskalen Basisfunktionen für periodische Koeffizienten über das Zellenproblem dargestellt werden können.

Ein großer Schritt in dieser Arbeit liegt in der Konstruktion einer adaptiven Verfeinerungsstrategie für numerische Homogenisierung. Zur adaptiven Verfeinerung des Gitters werden a posteriori Fehlerschätzer benötigt, nach der die Verfeinerungsstrategie vorgenommen werden soll. Obgleich es sich bei der numerischen Homogenisierung um eine konforme Methode handelt, besteht die größte Schwierigkeit in der Tatsache, dass wir durch diesen Prozess eine Näherungslösung erhalten, die eine FE-Approximation an eine andere Gleichung ist als an die, für die wir uns interessieren. Durch die Theorie der Homogenisierung konnten diese Gleichungen jedoch in einen quantifizierbaren Zusammenhang gesetzt werden. Wir haben mit dem oszillierenden residualen Fehlerschätzer somit einen für diese Methode geeigneten Fehlerschätzer konstruiert, der eine adaptive Verfeinerung in Bezug zur inhomogenen Gleichung zulässt.

Die konkrete Anwendung dieses Fehlerschätzers haben wir schließlich an einem Modellproblem beschrieben. Hierbei haben wir zur Verfeinerung die R-Adaptivität benutzt, die, im Unterschied zur populären h -Adaptivität, keine neuen Freiheitsgrade erzeugt, sondern das existierende Gitter unter Benutzung

einer Deformationsfunktion verändert. So ist es uns unter direkter Benutzung der durch den oszillierenden residualen Fehlerschätzer gegebenen Fehlerverteilung möglich, das Netz in Bereichen höheren Fehlers zu verdichten, während es in Bereichen niedrigen Fehlers gleichzeitig vergrößert wird. Hierdurch entsteht also die Aufgabe, eine zu einem Problem optimale Verteilung der Knoten zu bestimmen, so dass der Gesamtfehler minimal ist. Wir haben hierzu ein vereinfachtes Optimierungsproblem angegeben, konnten dies im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht weiter diskutieren.

Die bei der R-Adaptivität notwendige Verzerrung von Gittern haben wir schließlich mit einem auf heuristischen Methoden basierenden Gittergenerator realisiert, welcher von Persson und Strang [PS04] geschaffen wurde. Dieser in Kapitel 2 ausführlich behandelte Generator diente uns zur Triangulierung sämtlicher in der Arbeit behandelten Gebiete. Die Besonderheit besteht in der flexiblen Art, in der die zu triangulierenden Gebiete durch eine Distanzfunktion definiert werden. Dann wird über einen zu einem physikalischen Kräftegleichgewicht äquivalenten Glättungsprozess die Qualität des Gitters iterativ verbessert.

Bereits in der MsFEM ist dies von großem Nutzen, da dies zur Vernetzung der einzelnen Elemente der groben Skala bei der Berechnung der Multiskalen Basis dient. Wir haben diesen Algorithmus erweitert, so dass auch komplizierte Geometrien durch Vorgabe von Bilddateien trianguliert werden können und erhalten darüber hinaus einen einfachen Zugang zu den für die R-Adaptivität notwendigen Verformungen über eine quasi direkt durch den Fehler gegebene Dichtefunktion. Schließlich konnten wir über die Definition einer Qualitätskennzahl die Qualität von generierten Gittern mit verschiedenen Rändern quantifizieren und mit Ergebnissen aus der Literatur über den populären Laplaceglätter zur Gittergenerierung vergleichen, welcher in der Regel schlechtere Netze bei einem deutlich höheren Zeitaufwand produziert. Als Nachteil liegt bei unserem Gitteralgorithmus im Allgemeinen keine Konvergenz vor.

Schließlich war es ein Ziel dieser Arbeit, die vorgestellten und erweiterten Methoden an einem quasirealistischen Beispiel zu erproben. In Ermangelung einer Referenzlösung ist es hierbei schwierig, die Ergebnisse zu diskutieren. Hier stößt vor allem der Gittergenerator an seine Grenzen, da einzelne stark degenerierte Elemente bei der Triangulierung entstehen. In der Praxis beobachten wir dadurch, dass die adaptive Homogenisierung in nur sehr geringem Maße angewendet werden kann, da es sonst häufig zu großen Fehlern bei der Triangulierung kommt.

Beim direkten Vergleich der MsFEM und der numerischen Homogenisierung fällt der Vergleich an Rechenzeiten stark zugunsten der numerischen Homogenisierung aus. Dieser Vergleich ist jedoch insofern nicht sehr aussagestark, da sich die MsFEM zur Lösung allgemeiner Multiskalenprobleme eignet, wobei die numerische Homogenisierung zunächst auf periodische Probleme beschränkt ist.

Die Erweiterung der numerischen Homogenisierung für nichtperiodische Pro-

bleme sollte daher ein nächster Schritt sein. Hierbei sind statistische Methoden denkbar, mit denen eine quasiperiodische Struktur geschaffen werden soll, die die Homogenisierung der Gleichung mit den hier vorgestellten Methoden möglich macht. Ähnlich zur Repräsentativen Volumenelement Methode ist hier die mathematische Quantifizierung des Fehlers jedoch schwieriger.

Offene Fragen gibt es im gesamten Bereich noch, etwa wie sich Multiskalenprobleme mit mehr als zwei Skalen behandeln lassen oder wie Probleme mit stark oszillierenden Randwerten gelöst werden sollen.

Sicherlich wird die steigende Zahl an Anwendungen, die Multiskalenprobleme beinhalten, auch für eine steigende Zahl an Fragen sorgen, mit denen man sich in der numerischen Homogenisierung befassen muss.

Literaturverzeichnis

- [70810] SFB 708 (ed.), *3d-surface engineering für Werkzeugsysteme der Blechformteilefertigung, Berichtsband 2007-2010*, 2010.
- [AB05] G. Allaire and R. Brizzi, *A multiscale finite element method for numerical homogenization.*, Multiscale Model. Simul. **4** (2005), no. 3, 790–812 (English).
- [All92] G. Allaire, *Homogenization and two-scale convergence*, SIAM J. Math. Anal. **23** (1992), 623–727.
- [All99] ———, *Boundary layer tails in periodic homogenization*, Contr., Opt. and Calcu. of Var. **4** (1999), no. 1, 209–243 (English).
- [AO00] M. Ainsworth and J. T. Oden, *A posteriori error estimation in finite element analysis*, Wiley-Interscience, 2000.
- [Bab76] I. Babuška, *Solution of interface problems by homogenization 1*, Siam J. Math. Anal., Vol. 7, No. 5, 603-645 (1976).
- [BH96] F. Bossen and P. Heckbert, *A pliant method for anisotropic mesh generation.*, Proc. of the 5th Int. Meshing Roundtable (1996), 63–74 (English).
- [BLP78] A. Bensoussan, J.-L. Lions, and G. Papanicolaou, *Asymptotic analysis for periodic structures*, North Holland, Amsterdam, 1978.
- [BLP79] A. Bensoussan, J.-L. L. Lions, and G. Papanicolaou, *Boundary layers and homogenization of transport processes.*, Publ. Res. Inst. Math. Sci., Kyoto Univ. **15** (1979), 53–157 (English).
- [BP89] N.S. Bakhvalov and G. Panasenko, *Homogenisation: Averaging processes in periodic media. Mathematical problems in the mechanics of composite materials. Transl. from the Russian by D. Leites.*, Mathematics and its Applications: Soviet Series, 36. Dordrecht etc.: Kluwer Academic Publishers., 1989 (English).
- [Bra07] D. Braess, *Finite Elemente*, Springer, Berlin, 2007 (German).
- [CD99] D. Cioranescu and P. Donato, *An introduction to homogenization*, Oxford University Press, 1999.

- [EHW00] Y. Efendiev, T. Hou, and X.-H. Wu, *Convergence of a nonconforming multiscale finite element method.*, SIAM J. Numer. Anal. **37** (2000), no. 3, 888–910 (English).
- [Eva10] L. C. Evans, *Partial differential equations. 2nd ed.*, American Mathematical Society, 2010 (English).
- [Fie88] D. Field, *Laplacian smoothing and Delaunay triangulations.*, Commun. Appl. Numer. Methods **4** (1988), no. 6, 709–712 (English).
- [Fie00] ———, *Qualitative measures for initial meshes*, International Journal for Numerical Methods in Engineering **47** (2000), 887–906.
- [FK73] J. E. Flaherty and J. B. Keller, *Elastic behaviour of composite media*, Comm. Pure Appl. Math. XXVI, 565–580 (1973).
- [Geo91] P.L. George, *Automatic mesh generation. Application to finite element methods.*, Chichester: John Wiley & Sons Ltd.. Paris: Masson. x, 333 p. , 1991 (English).
- [GKT09] M. Grajewski, M. Köster, and S. Turek, *Mathematical and numerical analysis of a robust and efficient grid deformation method in the finite element context.*, SIAM J. Sci. Comput. **31** (2009), no. 2, 1539–1557 (English).
- [GT00] D. Gilbarg and N. Trudinger, *Elliptic partial differential equations of second order*, Springer, Berlin, 2000.
- [Hug00] T. Hughes, *The finite element method*, Dover, 2000.
- [HW97] T. Hou and X.-H. Wu, *A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media*, Journ. Comp. Phys. **134**, 169–198 (1997).
- [Kab99] W. Kaballo, *Einführung in die Analysis 3*, Vieweg Verlag, 1999.
- [LA92] G. Liao and D. Anderson, *A new approach to grid generation.*, Appl. Anal. **44** (1992), no. 3–4, 285–298 (English).
- [LL00] E. Lieb and M. Loss, *Analysis*, American Mathematical Society, 2000.
- [LZ84] Q. Lin and Q. Zhu, *Asymptotic expansion for the derivative of finite elements*, J. Comput. Math. **2** (1984), 361–363.
- [MT97] F. Murat and L. Tartar, *H-convergence, topics in the mathematical modelling of composite materials, 21–43*, 1997.
- [OSCS99] S.J. Owen, M.L. Staten, S.A. Canann, and S. Saigal, *Q-Morph: An indirect approach to advancing front quad meshing.*, Int. J. Numer. Methods Eng. **44** (1999), no. 9, 1317–1340 (English).

- [PS04] P. Persson and G. Strang, *A simple mesh generator in MATLAB.*, SIAM Rev. **46** (2004), no. 2, 329–345 (English).
- [Spa67] S. Spagnolo, *Sul limite delle soluzioni di problemi di cauchy relativi all'equazione del calore*, Ann. Sc. Norm. Sup. Pisa, **21**, 657-699 (1967).
- [Spa68] ———, *Sulla convergenza di soluzioni di equazioni paraboliche ed ellittiche*, Ann. Sc. Norm. Sup. Pisa, **22**, 571-597 (1968).
- [Tar78] L. Tartar, *Functional and numerical analysis, proc, japan-france seminar 1976*, Japanese Society for the Promotion of Science, 1978.
- [ZLN04] T. Zhang, C. Li, and Y. Nie, *Derivative superconvergence of linear finite elements by recovery techniques.*, Dyn. Contin. Discrete Impuls. Syst., Ser. A, Math. Anal. **11** (2004), no. 5-6, 853–862 (English).